



Full wwPDB X-ray Structure Validation Report ⓘ

Mar 7, 2026 – 02:45 AM UTC

PDB ID : 7MHM / pdb_00007mhm
Title : Ensemble refinement structure of SARS-CoV-2 main protease (Mpro) at 240 K
Authors : Ebrahim, A.; Riley, B.T.; Kumaran, D.; Andi, B.; Fuchs, M.R.; McSweeney, S.; Keedy, D.A.
Deposited on : 2021-04-15
Resolution : 1.53 Å(reported)

This is a Full wwPDB X-ray Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/XrayValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
Mogul : 2022.3.0, CSD as543be (2022)
Xtriage (Phenix) : 2.0
EDS : 3.0
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
CCP4 : 9.0.010 (Gargrove)
Density-Fitness : 1.0.12
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

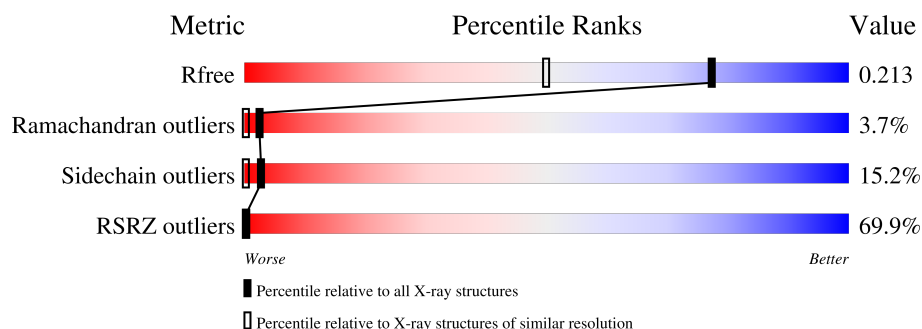
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

X-RAY DIFFRACTION

The reported resolution of this entry is 1.53 Å.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	Similar resolution (#Entries, resolution range(Å))
R_{free}	180053	1003 (1.54-1.54)
Ramachandran outliers	187476	1007 (1.54-1.54)
Sidechain outliers	187428	1007 (1.54-1.54)
RSRZ outliers	180081	1002 (1.54-1.54)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the electron density. The red, orange, yellow and green segments of the lower bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$. The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the electron density. The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	1-A	306	70% 84% 14% .
1	10-A	306	84% 14% .
1	11-A	306	83% 14% .
1	12-A	306	85% 13% .
1	13-A	306	85% 14% .
1	14-A	306	85% 14% .
1	15-A	306	84% 13% ..

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	16-A	306	 84% 14% .
1	17-A	306	 85% 14% .
1	18-A	306	 84% 15% .
1	19-A	306	 83% 13% .
1	2-A	306	 81% 15% .
1	20-A	306	 85% 13% .
1	21-A	306	 84% 13% .
1	22-A	306	 86% 13% .
1	23-A	306	 84% 15% .
1	24-A	306	 83% 15% .
1	25-A	306	 84% 14% .
1	26-A	306	 83% 15% .
1	27-A	306	 84% 12% ..
1	28-A	306	 84% 13% ..
1	29-A	306	 83% 15% .
1	3-A	306	 85% 12% ..
1	30-A	306	 84% 14% ..
1	31-A	306	 85% 14% .
1	32-A	306	 83% 14% .
1	33-A	306	 82% 15% ..
1	34-A	306	 82% 15% .
1	35-A	306	 85% 12% .
1	36-A	306	 84% 13% .
1	37-A	306	 83% 15% .
1	38-A	306	 82% 16% ..

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	39-A	306	 82% 15% .
1	4-A	306	 83% 13% .
1	40-A	306	 85% 14% .
1	41-A	306	 83% 14% .
1	42-A	306	 82% 16% .
1	43-A	306	 83% 14% .
1	5-A	306	 83% 14% .
1	6-A	306	 84% 14% .
1	7-A	306	 82% 17% .
1	8-A	306	 83% 15% .
1	9-A	306	 83% 15% .

The following table lists non-polymeric compounds, carbohydrate monomers and non-standard residues in protein, DNA, RNA chains that are outliers for geometric or electron-density-fit criteria:

Mol	Type	Chain	Res	Chirality	Geometry	Clashes	Electron density
2	DMS	1-A	402	-	-	-	X
2	DMS	1-A	403	-	-	-	X
2	DMS	1-A	405	-	-	-	X
2	DMS	1-A	406	-	-	-	X
2	DMS	12-A	402	-	X	-	-
2	DMS	23-A	402	-	X	-	-
2	DMS	3-A	406	-	X	-	-
2	DMS	39-A	402	-	X	-	-
2	DMS	4-A	404	-	X	-	-

2 Entry composition

There are 4 unique types of molecules in this entry. The entry contains 210185 atoms, of which 101308 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the ZeroOcc column contains the number of atoms modelled with zero occupancy, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

- Molecule 1 is a protein called 3C-like proteinase.

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	1-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	2-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	3-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	4-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	5-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	6-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	7-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	8-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	9-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	10-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	11-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	12-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	13-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	14-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	15-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	16-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			

Continued on next page...

Continued from previous page...

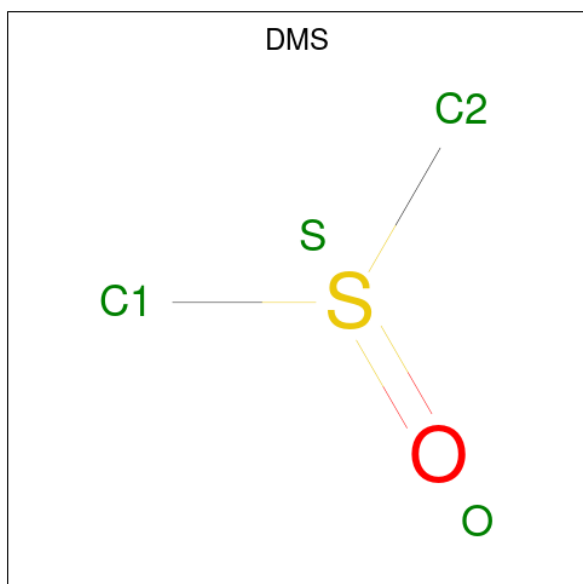
Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	17-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	18-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	19-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	20-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	21-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	22-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	23-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	24-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	25-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	26-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	27-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	28-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	29-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	30-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	31-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	32-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	33-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	34-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	35-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	36-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0
1	37-A	306	Total 4681	C 1499	H 2314	N 402	O 444	S 22	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms						ZeroOcc	AltConf	Trace
1	38-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	39-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	40-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	41-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	42-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			
1	43-A	306	Total	C	H	N	O	S	0	0	0
			4681	1499	2314	402	444	22			

- Molecule 2 is DIMETHYL SULFOXIDE (CCD ID: DMS) (formula: C_2H_6OS).



Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	1-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	2-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	3-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	4-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	5-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	6-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	7-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	8-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	9-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	10-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	11-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	12-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	13-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	14-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	15-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	16-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	17-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	18-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	19-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	20-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	21-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	22-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	23-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	24-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	25-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	26-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	27-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	28-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	29-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	30-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	31-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	32-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	33-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	34-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	35-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	36-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	37-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	38-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	39-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	40-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	41-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms					ZeroOcc	AltConf
2	42-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		
2	43-A	1	Total	C	H	O	S	0	0
			10	2	6	1	1		

- Molecule 3 is ZINC ION (CCD ID: ZN) (formula: Zn).

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	1-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	2-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	3-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	4-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	5-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	6-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	7-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	8-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	9-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	10-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	11-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	12-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	13-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	14-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	15-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	16-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		
3	17-A	1	Total	Zn	0	0
			1	1		

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	18-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	19-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	20-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	21-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	22-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	23-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	24-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	25-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	26-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	27-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	28-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	29-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	30-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	31-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	32-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	33-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	34-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	35-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	36-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	37-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	38-A	1	Total 1	Zn 1	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
3	39-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	40-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	41-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	42-A	1	Total 1	Zn 1	0	0
3	43-A	1	Total 1	Zn 1	0	0

- Molecule 4 is water.

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	1-A	148	Total 148	O 148	0	0
4	2-A	135	Total 135	O 135	0	0
4	3-A	134	Total 134	O 134	0	0
4	4-A	142	Total 142	O 142	0	0
4	5-A	140	Total 140	O 140	0	0
4	6-A	145	Total 145	O 145	0	0
4	7-A	133	Total 133	O 133	0	0
4	8-A	131	Total 131	O 131	0	0
4	9-A	147	Total 147	O 147	0	0
4	10-A	146	Total 146	O 146	0	0
4	11-A	137	Total 137	O 137	0	0
4	12-A	141	Total 141	O 141	0	0
4	13-A	130	Total 130	O 130	0	0
4	14-A	135	Total 135	O 135	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms	ZeroOcc	AltConf
4	15-A	136	Total O 136 136	0	0
4	16-A	121	Total O 121 121	0	0
4	17-A	152	Total O 152 152	0	0
4	18-A	122	Total O 122 122	0	0
4	19-A	141	Total O 141 141	0	0
4	20-A	131	Total O 131 131	0	0
4	21-A	142	Total O 142 142	0	0
4	22-A	139	Total O 139 139	0	0
4	23-A	134	Total O 134 134	0	0
4	24-A	138	Total O 138 138	0	0
4	25-A	145	Total O 145 145	0	0
4	26-A	125	Total O 125 125	0	0
4	27-A	144	Total O 144 144	0	0
4	28-A	135	Total O 135 135	0	0
4	29-A	144	Total O 144 144	0	0
4	30-A	146	Total O 146 146	0	0
4	31-A	136	Total O 136 136	0	0
4	32-A	122	Total O 122 122	0	0
4	33-A	134	Total O 134 134	0	0
4	34-A	123	Total O 123 123	0	0
4	35-A	130	Total O 130 130	0	0

Continued on next page...

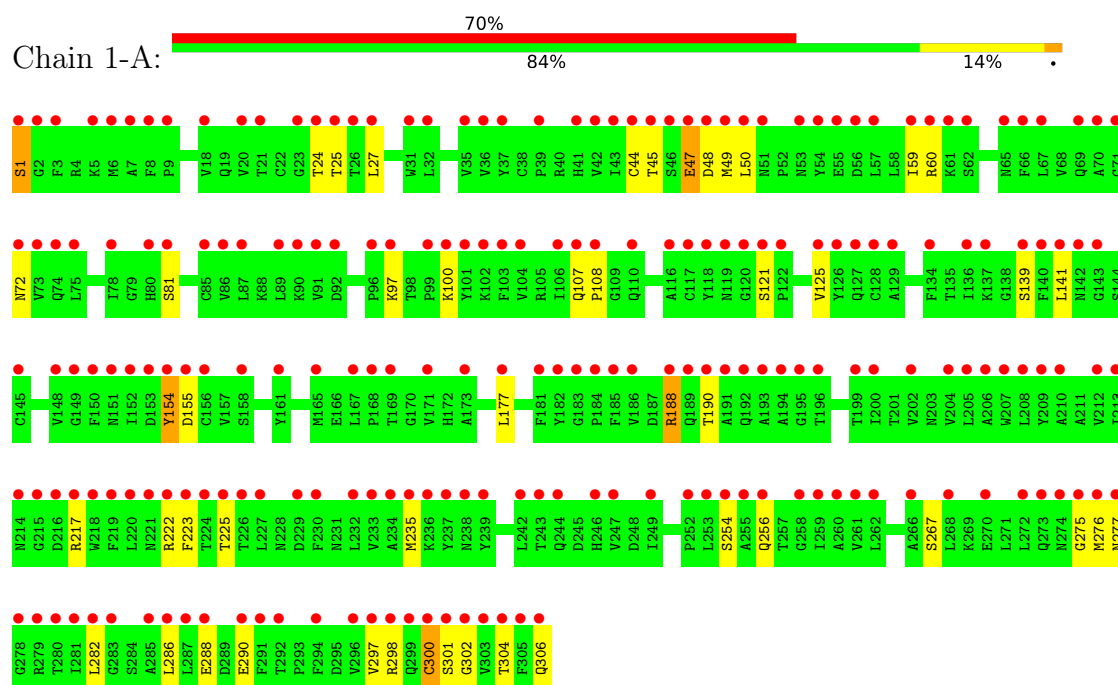
Continued from previous page...

Mol	Chain	Residues	Atoms		ZeroOcc	AltConf
4	36-A	139	Total 139	O 139	0	0
4	37-A	140	Total 140	O 140	0	0
4	38-A	120	Total 120	O 120	0	0
4	39-A	145	Total 145	O 145	0	0
4	40-A	121	Total 121	O 121	0	0
4	41-A	127	Total 127	O 127	0	0
4	42-A	133	Total 133	O 133	0	0
4	43-A	140	Total 140	O 140	0	0

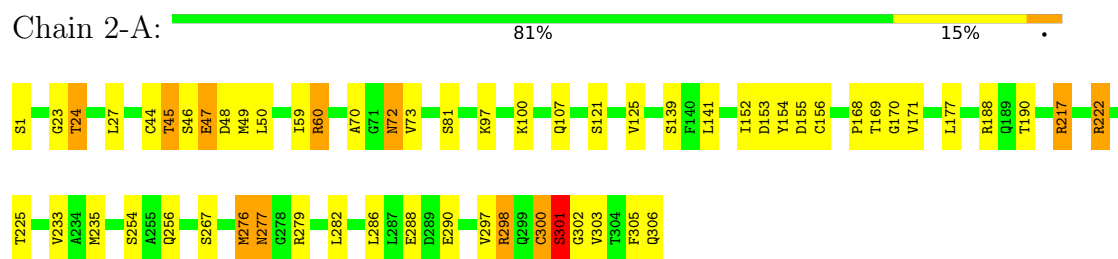
3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and electron density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red dot above a residue indicates a poor fit to the electron density ($RSRZ > 2$). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

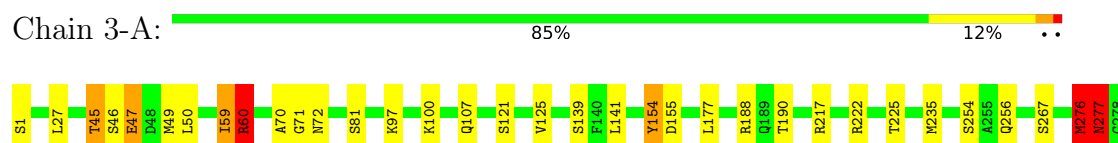
• Molecule 1: 3C-like proteinase



• Molecule 1: 3C-like proteinase

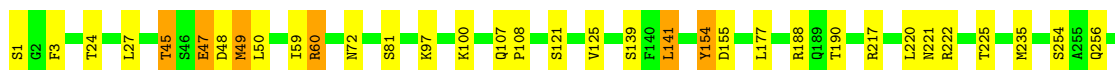
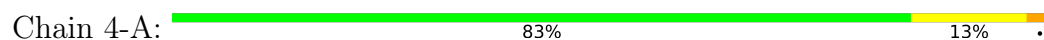


• Molecule 1: 3C-like proteinase

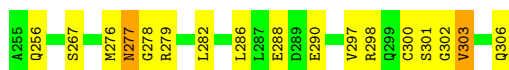
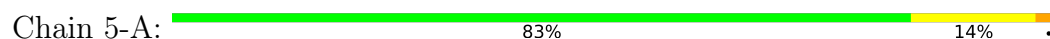




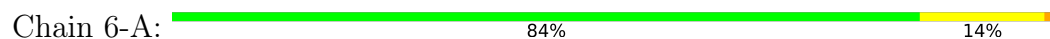
- Molecule 1: 3C-like proteinase



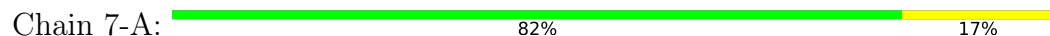
- Molecule 1: 3C-like proteinase



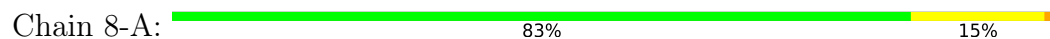
- Molecule 1: 3C-like proteinase



- Molecule 1: 3C-like proteinase



- Molecule 1: 3C-like proteinase





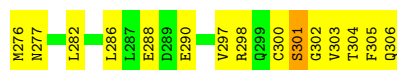
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 9-A: 83% 15% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 10-A: 84% 14% .



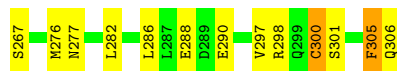
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 11-A: 83% 14% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 12-A: 85% 13% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 13-A: 85% 14% .





- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 14-A: 85% 14%



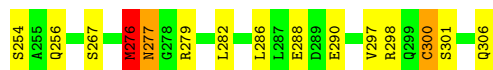
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 15-A: 84% 13%



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 16-A: 84% 14%



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 17-A: 85% 14%



- Molecule 1: 3C-like proteinase

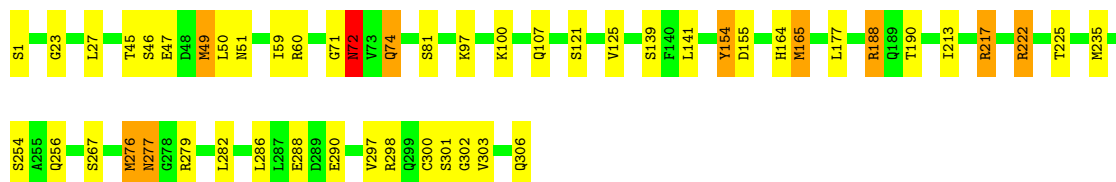
Chain 18-A: 84% 15%





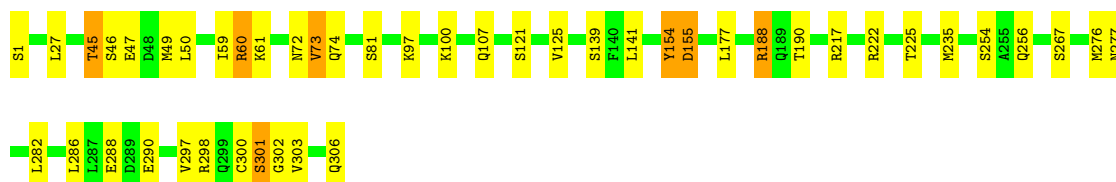
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 19-A: 83% 13% .



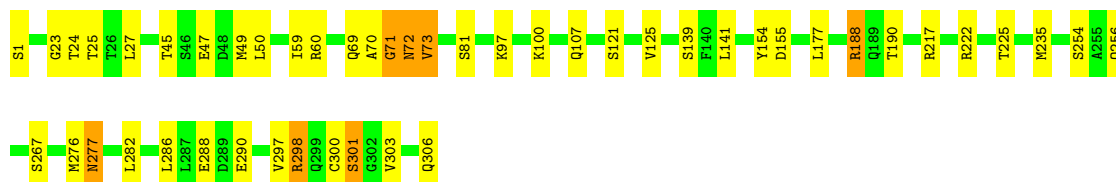
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 20-A: 85% 13% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 21-A: 84% 13% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 22-A: 86% 13% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

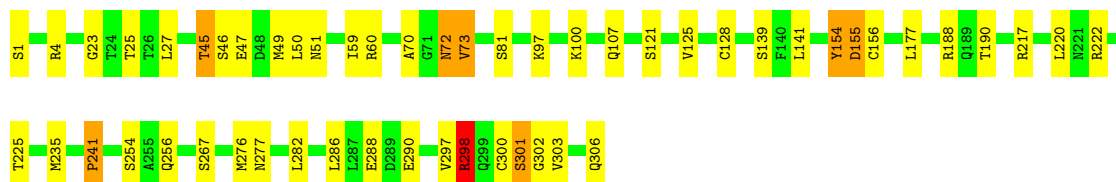
Chain 23-A: 84% 15% .





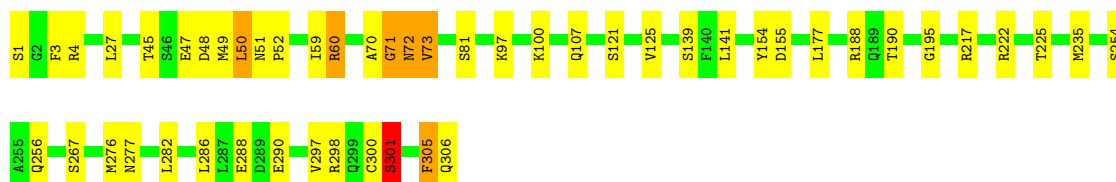
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 24-A: 83% 15% .



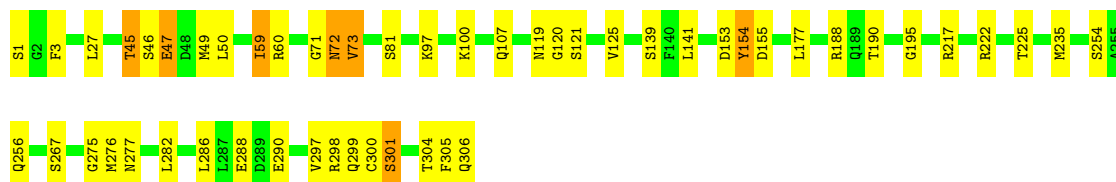
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 25-A: 84% 14% .



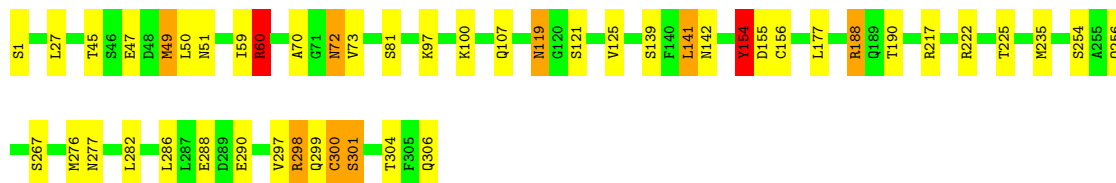
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 26-A: 83% 15% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 27-A: 84% 12% . .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 28-A: 84% 13% . .





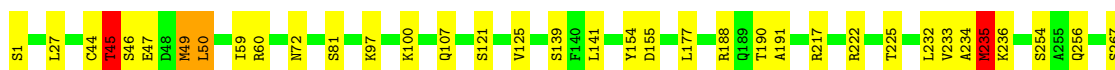
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 29-A: 83% 15% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 30-A: 84% 14% ..



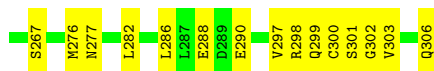
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 31-A: 85% 14% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 32-A: 83% 14% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

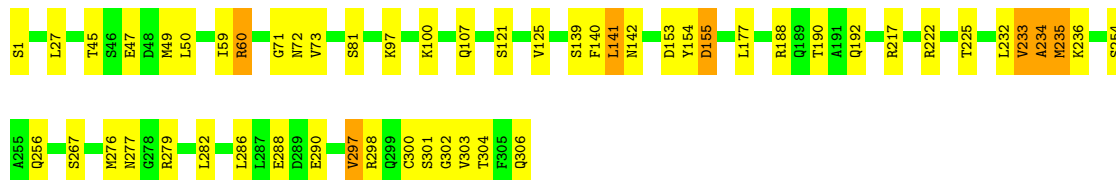
Chain 33-A: 82% 15% ..





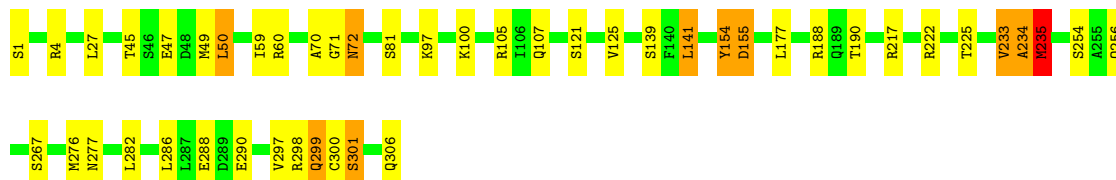
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 34-A: 82% 15% .



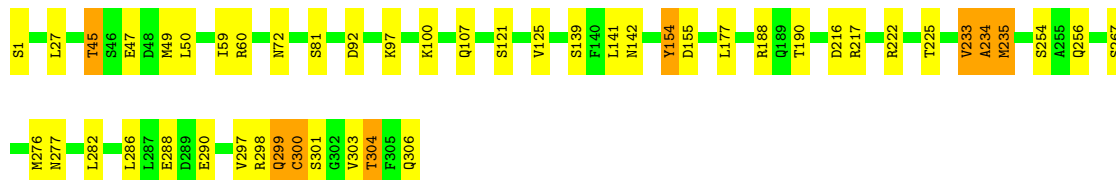
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 35-A: 85% 12% .



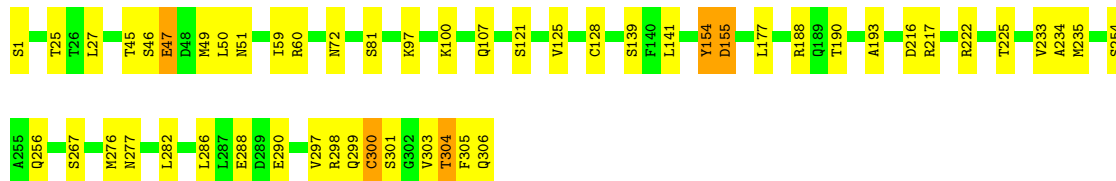
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 36-A: 84% 13% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

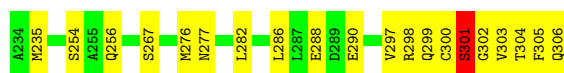
Chain 37-A: 83% 15% .



- Molecule 1: 3C-like proteinase

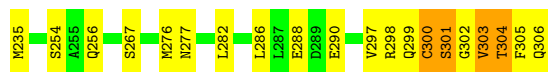
Chain 38-A: 82% 16% ..





- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 39-A: 82% 15% 3%



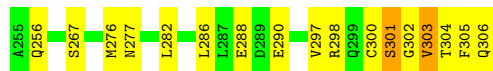
- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 40-A: 85% 14% 1%



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 41-A: 83% 14% 3%



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 42-A: 82% 16% 2%



- Molecule 1: 3C-like proteinase

Chain 43-A: 83% 14% 3%



S254	A255	Q256	S267	M276	M277	L282	L286	L287	E288	D289	E290	V297	R298	Q299	C300	S301	G302	V303	T304	F305	Q306
------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------

4 Data and refinement statistics

Property	Value	Source
Space group	C 1 2 1	Depositor
Cell constants a, b, c, α , β , γ	114.19Å 53.49Å 45.00Å 90.00° 103.04° 90.00°	Depositor
Resolution (Å)	48.20 – 1.53 48.20 – 1.53	Depositor EDS
% Data completeness (in resolution range)	99.9 (48.20-1.53) 89.1 (48.20-1.53)	Depositor EDS
R_{merge}	0.18	Depositor
R_{sym}	(Not available)	Depositor
$\langle I/\sigma(I) \rangle$ ¹	0.86 (at 1.53Å)	Xtriage
Refinement program	PHENIX (phenix.ensemble_refinement:1.19.2_4158)	Depositor
R, R_{free}	0.158 , 0.197 0.173 , 0.213	Depositor DCC
R_{free} test set	2007 reflections (5.02%)	wwPDB-VP
Wilson B-factor (Å ²)	16.3	Xtriage
Anisotropy	0.260	Xtriage
Bulk solvent k_{sol} (e/Å ³), B_{sol} (Å ²)	0.01 , 19.7	EDS
L-test for twinning ²	$\langle L \rangle = 0.51$, $\langle L^2 \rangle = 0.34$	Xtriage
Estimated twinning fraction	No twinning to report.	Xtriage
F_o, F_c correlation	0.87	EDS
Total number of atoms	210185	wwPDB-VP
Average B, all atoms (Å ²)	19.0	wwPDB-VP

Xtriage's analysis on translational NCS is as follows: *The largest off-origin peak in the Patterson function is 10.27% of the height of the origin peak. No significant pseudotranslation is detected.*

¹Intensities estimated from amplitudes.

²Theoretical values of $\langle |L| \rangle$, $\langle L^2 \rangle$ for acentric reflections are 0.5, 0.333 respectively for untwinned datasets, and 0.375, 0.2 for perfectly twinned datasets.

5 Model quality

5.1 Standard geometry

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: ZN, DMS

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	1-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	2-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	3-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	4-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	5-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	6-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	7-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	8-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	9-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	10-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	11-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	12-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	13-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	14-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	15-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	16-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	17-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	18-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	19-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	20-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	21-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	22-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	23-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	24-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	25-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	26-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	27-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	28-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	29-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	30-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	31-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	32-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	# Z >5	RMSZ	# Z >5
1	33-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	34-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	35-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	36-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	37-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	38-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	39-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	40-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	41-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	42-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
1	43-A	0.12	0/2420	0.16	0/3289
All	All	0.12	0/104060	0.16	0/141427

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	1-A	0	5
1	2-A	0	12
1	3-A	0	10
1	4-A	0	8
1	5-A	0	14
1	6-A	0	4
1	7-A	0	7
1	8-A	0	5
1	9-A	0	7
1	10-A	0	4
1	11-A	0	7
1	12-A	0	6
1	13-A	0	5
1	14-A	0	6
1	15-A	0	8
1	16-A	0	6
1	17-A	0	5
1	18-A	0	2
1	19-A	0	11
1	20-A	0	5
1	21-A	0	4
1	22-A	0	1
1	23-A	0	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	#Chirality outliers	#Planarity outliers
1	24-A	0	9
1	25-A	0	8
1	26-A	0	2
1	27-A	0	9
1	28-A	0	8
1	29-A	0	8
1	30-A	0	9
1	31-A	0	3
1	32-A	0	6
1	33-A	0	9
1	34-A	0	9
1	35-A	0	6
1	36-A	0	7
1	37-A	0	3
1	38-A	0	7
1	39-A	0	9
1	40-A	0	4
1	41-A	0	7
1	42-A	0	12
1	43-A	0	9
All	All	0	292

There are no bond length outliers.

There are no bond angle outliers.

There are no chirality outliers.

All (292) planarity outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	1-A	1	SER	Peptide
1	1-A	188	ARG	Sidechain
1	1-A	25	THR	Peptide
1	1-A	300	CYS	Peptide
1	1-A	44	CYS	Peptide
1	10-A	1	SER	Peptide
1	10-A	23	GLY	Peptide
1	10-A	24	THR	Peptide
1	10-A	71	GLY	Peptide
1	11-A	151	ASN	Peptide
1	11-A	188	ARG	Sidechain
1	11-A	191	ALA	Peptide
1	11-A	192	GLN	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	11-A	301	SER	Peptide
1	11-A	303	VAL	Peptide
1	11-A	70	ALA	Peptide
1	12-A	142	ASN	Peptide
1	12-A	300	CYS	Peptide
1	12-A	305	PHE	Peptide
1	12-A	4	ARG	Sidechain
1	12-A	52	PRO	Peptide
1	12-A	60	ARG	Peptide
1	13-A	298	ARG	Sidechain
1	13-A	300	CYS	Peptide
1	13-A	301	SER	Peptide
1	13-A	4	ARG	Sidechain
1	13-A	71	GLY	Peptide
1	14-A	153	ASP	Peptide
1	14-A	300	CYS	Peptide,Mainchain
1	14-A	303	VAL	Peptide
1	14-A	304	THR	Peptide
1	14-A	4	ARG	Sidechain
1	15-A	1	SER	Peptide
1	15-A	278	GLY	Peptide
1	15-A	300	CYS	Peptide
1	15-A	301	SER	Peptide
1	15-A	303	VAL	Peptide
1	15-A	45	THR	Peptide
1	15-A	46	SER	Peptide
1	15-A	71	GLY	Peptide
1	16-A	1	SER	Peptide
1	16-A	220	LEU	Peptide
1	16-A	276	MET	Peptide
1	16-A	279	ARG	Sidechain
1	16-A	300	CYS	Peptide
1	16-A	70	ALA	Peptide
1	17-A	217	ARG	Peptide
1	17-A	24	THR	Peptide
1	17-A	302	GLY	Peptide
1	17-A	48	ASP	Peptide
1	17-A	72	ASN	Peptide
1	18-A	22	CYS	Peptide
1	18-A	302	GLY	Peptide
1	19-A	164	HIS	Peptide
1	19-A	165	MET	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	19-A	188	ARG	Sidechain
1	19-A	213	ILE	Peptide
1	19-A	217	ARG	Sidechain
1	19-A	222	ARG	Sidechain
1	19-A	276	MET	Peptide
1	19-A	303	VAL	Peptide
1	19-A	49	MET	Peptide
1	19-A	72	ASN	Peptide
1	19-A	74	GLN	Peptide
1	2-A	152	ILE	Peptide
1	2-A	156	CYS	Peptide
1	2-A	217	ARG	Sidechain
1	2-A	24	THR	Peptide
1	2-A	276	MET	Peptide
1	2-A	279	ARG	Sidechain
1	2-A	298	ARG	Peptide
1	2-A	301	SER	Peptide
1	2-A	302	GLY	Peptide
1	2-A	44	CYS	Peptide
1	2-A	48	ASP	Peptide
1	2-A	60	ARG	Peptide
1	20-A	188	ARG	Sidechain
1	20-A	302	GLY	Peptide
1	20-A	303	VAL	Peptide
1	20-A	45	THR	Peptide
1	20-A	73	VAL	Peptide
1	21-A	188	ARG	Sidechain
1	21-A	69	GLN	Peptide
1	21-A	71	GLY	Peptide
1	21-A	73	VAL	Peptide
1	22-A	298	ARG	Sidechain
1	23-A	128	CYS	Peptide
1	23-A	141	LEU	Peptide
1	23-A	153	ASP	Peptide
1	23-A	303	VAL	Peptide
1	23-A	52	PRO	Peptide
1	23-A	92	ASP	Peptide
1	24-A	128	CYS	Peptide
1	24-A	154	TYR	Peptide
1	24-A	156	CYS	Peptide
1	24-A	241	PRO	Peptide
1	24-A	298	ARG	Sidechain

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	24-A	4	ARG	Sidechain
1	24-A	45	THR	Peptide
1	24-A	70	ALA	Peptide
1	24-A	73	VAL	Peptide
1	25-A	301	SER	Peptide
1	25-A	305	PHE	Peptide
1	25-A	4	ARG	Sidechain
1	25-A	50	LEU	Peptide
1	25-A	60	ARG	Peptide
1	25-A	70	ALA	Peptide
1	25-A	71	GLY	Peptide
1	25-A	73	VAL	Peptide
1	26-A	153	ASP	Peptide
1	26-A	73	VAL	Peptide
1	27-A	119	ASN	Peptide
1	27-A	141	LEU	Peptide
1	27-A	154	TYR	Peptide
1	27-A	188	ARG	Sidechain
1	27-A	298	ARG	Sidechain
1	27-A	299	GLN	Peptide
1	27-A	304	THR	Peptide
1	27-A	60	ARG	Peptide
1	27-A	73	VAL	Peptide
1	28-A	101	TYR	Peptide
1	28-A	120	GLY	Peptide
1	28-A	217	ARG	Sidechain
1	28-A	235	MET	Peptide
1	28-A	305	PHE	Peptide
1	28-A	59	ILE	Peptide
1	28-A	60	ARG	Peptide
1	28-A	72	ASN	Peptide
1	29-A	120	GLY	Peptide
1	29-A	23	GLY	Peptide
1	29-A	24	THR	Peptide
1	29-A	274	ASN	Peptide
1	29-A	302	GLY	Peptide
1	29-A	60	ARG	Peptide
1	29-A	70	ALA	Peptide
1	29-A	73	VAL	Peptide
1	3-A	276	MET	Peptide
1	3-A	277	ASN	Peptide
1	3-A	301	SER	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	3-A	302	GLY	Peptide
1	3-A	305	PHE	Peptide
1	3-A	45	THR	Peptide
1	3-A	47	GLU	Peptide
1	3-A	59	ILE	Peptide
1	3-A	60	ARG	Peptide
1	3-A	70	ALA	Peptide
1	30-A	232	LEU	Peptide
1	30-A	235	MET	Peptide
1	30-A	275	GLY	Peptide
1	30-A	279	ARG	Sidechain
1	30-A	298	ARG	Sidechain
1	30-A	305	PHE	Peptide
1	30-A	44	CYS	Peptide
1	30-A	45	THR	Peptide
1	30-A	49	MET	Peptide
1	31-A	235	MET	Peptide
1	31-A	274	ASN	Peptide
1	31-A	275	GLY	Peptide
1	32-A	190	THR	Peptide
1	32-A	217	ARG	Sidechain
1	32-A	232	LEU	Peptide
1	32-A	302	GLY	Peptide
1	32-A	60	ARG	Sidechain
1	32-A	73	VAL	Peptide
1	33-A	139	SER	Peptide
1	33-A	141	LEU	Peptide
1	33-A	234	ALA	Peptide
1	33-A	235	MET	Peptide
1	33-A	298	ARG	Sidechain
1	33-A	300	CYS	Peptide
1	33-A	304	THR	Peptide
1	33-A	46	SER	Peptide
1	33-A	60	ARG	Peptide
1	34-A	140	PHE	Mainchain
1	34-A	153	ASP	Peptide
1	34-A	232	LEU	Peptide
1	34-A	233	VAL	Peptide
1	34-A	234	ALA	Peptide
1	34-A	279	ARG	Sidechain
1	34-A	297	VAL	Peptide
1	34-A	304	THR	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	34-A	60	ARG	Sidechain
1	35-A	105	ARG	Sidechain
1	35-A	233	VAL	Peptide
1	35-A	234	ALA	Peptide
1	35-A	235	MET	Peptide
1	35-A	299	GLN	Peptide
1	35-A	4	ARG	Sidechain
1	36-A	216	ASP	Peptide
1	36-A	233	VAL	Peptide
1	36-A	234	ALA	Peptide
1	36-A	299	GLN	Peptide
1	36-A	304	THR	Peptide
1	36-A	45	THR	Peptide
1	36-A	92	ASP	Peptide
1	37-A	128	CYS	Peptide
1	37-A	234	ALA	Peptide
1	37-A	304	THR	Peptide
1	38-A	152	ILE	Peptide
1	38-A	153	ASP	Peptide
1	38-A	231	ASN	Peptide
1	38-A	301	SER	Peptide
1	38-A	72	ASN	Peptide
1	38-A	73	VAL	Peptide
1	38-A	97	LYS	Peptide
1	39-A	152	ILE	Peptide
1	39-A	155	ASP	Peptide
1	39-A	23	GLY	Peptide
1	39-A	233	VAL	Peptide
1	39-A	234	ALA	Peptide
1	39-A	25	THR	Peptide
1	39-A	299	GLN	Peptide
1	39-A	303	VAL	Peptide
1	39-A	304	THR	Peptide
1	4-A	221	ASN	Peptide
1	4-A	275	GLY	Peptide
1	4-A	278	GLY	Peptide
1	4-A	279	ARG	Sidechain
1	4-A	298	ARG	Sidechain
1	4-A	300	CYS	Peptide
1	4-A	301	SER	Peptide
1	4-A	305	PHE	Peptide
1	40-A	233	VAL	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	40-A	234	ALA	Peptide
1	40-A	302	GLY	Peptide
1	40-A	304	THR	Peptide
1	41-A	1	SER	Peptide
1	41-A	141	LEU	Peptide
1	41-A	190	THR	Peptide
1	41-A	233	VAL	Peptide
1	41-A	235	MET	Peptide
1	41-A	303	VAL	Peptide
1	41-A	44	CYS	Peptide
1	42-A	120	GLY	Peptide
1	42-A	141	LEU	Peptide
1	42-A	155	ASP	Peptide
1	42-A	220	LEU	Peptide
1	42-A	232	LEU	Peptide
1	42-A	233	VAL	Peptide
1	42-A	234	ALA	Peptide
1	42-A	279	ARG	Sidechain
1	42-A	298	ARG	Sidechain
1	42-A	304	THR	Peptide
1	42-A	4	ARG	Sidechain
1	42-A	70	ALA	Peptide
1	43-A	1	SER	Peptide
1	43-A	128	CYS	Peptide
1	43-A	141	LEU	Peptide
1	43-A	142	ASN	Peptide
1	43-A	156	CYS	Peptide
1	43-A	300	CYS	Peptide
1	43-A	302	GLY	Peptide
1	43-A	50	LEU	Peptide
1	43-A	72	ASN	Peptide
1	5-A	141	LEU	Peptide
1	5-A	154	TYR	Peptide
1	5-A	220	LEU	Peptide
1	5-A	23	GLY	Peptide
1	5-A	24	THR	Peptide
1	5-A	278	GLY	Peptide
1	5-A	279	ARG	Sidechain
1	5-A	302	GLY	Peptide
1	5-A	303	VAL	Peptide
1	5-A	48	ASP	Peptide
1	5-A	60	ARG	Peptide

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group
1	5-A	70	ALA	Peptide
1	5-A	71	GLY	Peptide
1	5-A	72	ASN	Peptide
1	6-A	23	GLY	Peptide
1	6-A	24	THR	Peptide
1	6-A	277	ASN	Peptide
1	6-A	61	LYS	Peptide
1	7-A	141	LEU	Peptide
1	7-A	150	PHE	Peptide
1	7-A	217	ARG	Sidechain
1	7-A	275	GLY	Peptide
1	7-A	278	GLY	Peptide
1	7-A	280	THR	Peptide
1	7-A	302	GLY	Peptide
1	8-A	157	VAL	Peptide
1	8-A	298	ARG	Sidechain
1	8-A	300	CYS	Peptide
1	8-A	60	ARG	Sidechain
1	8-A	71	GLY	Peptide
1	9-A	142	ASN	Peptide
1	9-A	152	ILE	Peptide
1	9-A	153	ASP	Peptide
1	9-A	155	ASP	Peptide
1	9-A	23	GLY	Peptide
1	9-A	24	THR	Peptide
1	9-A	275	GLY	Peptide

5.2 Too-close contacts ⓘ

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry-related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	1-A	2367	2314	2313	0	0
1	2-A	2367	2314	2313	0	0
1	3-A	2367	2314	2313	0	0
1	4-A	2367	2314	2313	0	0
1	5-A	2367	2314	2313	0	0
1	6-A	2367	2314	2314	0	0
1	7-A	2367	2314	2313	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	8-A	2367	2314	2313	0	0
1	9-A	2367	2314	2313	0	0
1	10-A	2367	2314	2313	0	0
1	11-A	2367	2314	2314	0	0
1	12-A	2367	2314	2313	0	0
1	13-A	2367	2314	2313	0	0
1	14-A	2367	2314	2313	0	0
1	15-A	2367	2314	2313	0	0
1	16-A	2367	2314	2313	0	0
1	17-A	2367	2314	2314	0	0
1	18-A	2367	2314	2313	0	0
1	19-A	2367	2314	2313	0	0
1	20-A	2367	2314	2313	0	0
1	21-A	2367	2314	2313	0	0
1	22-A	2367	2314	2313	0	0
1	23-A	2367	2314	2313	0	0
1	24-A	2367	2314	2314	0	0
1	25-A	2367	2314	2313	0	0
1	26-A	2367	2314	2313	0	0
1	27-A	2367	2314	2313	0	0
1	28-A	2367	2314	2314	0	0
1	29-A	2367	2314	2313	0	0
1	30-A	2367	2314	2313	0	0
1	31-A	2367	2314	2313	0	0
1	32-A	2367	2314	2313	0	0
1	33-A	2367	2314	2313	0	0
1	34-A	2367	2314	2313	0	0
1	35-A	2367	2314	2313	0	0
1	36-A	2367	2314	2313	0	0
1	37-A	2367	2314	2313	0	0
1	38-A	2367	2314	2313	0	0
1	39-A	2367	2314	2313	0	0
1	40-A	2367	2314	2313	0	0
1	41-A	2367	2314	2313	0	0
1	42-A	2367	2314	2314	0	0
1	43-A	2367	2314	2313	0	0
2	1-A	28	42	42	0	0
2	2-A	28	42	42	0	0
2	3-A	28	42	42	0	0
2	4-A	28	42	42	0	0
2	5-A	28	42	42	0	0
2	6-A	28	42	42	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
2	7-A	28	42	42	0	0
2	8-A	28	42	42	0	0
2	9-A	28	42	42	0	0
2	10-A	28	42	42	0	0
2	11-A	28	42	42	0	0
2	12-A	28	42	42	0	0
2	13-A	28	42	42	0	0
2	14-A	28	42	42	0	0
2	15-A	28	42	42	0	0
2	16-A	28	42	42	0	0
2	17-A	28	42	42	0	0
2	18-A	28	42	42	0	0
2	19-A	28	42	42	0	0
2	20-A	28	42	42	0	0
2	21-A	28	42	42	0	0
2	22-A	28	42	42	0	0
2	23-A	28	42	42	0	0
2	24-A	28	42	42	0	0
2	25-A	28	42	42	0	0
2	26-A	28	42	42	0	0
2	27-A	28	42	42	0	0
2	28-A	28	42	42	0	0
2	29-A	28	42	42	0	0
2	30-A	28	42	42	0	0
2	31-A	28	42	42	0	0
2	32-A	28	42	42	0	0
2	33-A	28	42	42	0	0
2	34-A	28	42	42	0	0
2	35-A	28	42	42	0	0
2	36-A	28	42	42	0	0
2	37-A	28	42	42	0	0
2	38-A	28	42	42	0	0
2	39-A	28	42	42	0	0
2	40-A	28	42	42	0	0
2	41-A	28	42	42	0	0
2	42-A	28	42	42	0	0
2	43-A	28	42	42	0	0
3	1-A	1	0	0	0	0
3	2-A	1	0	0	0	0
3	3-A	1	0	0	0	0
3	4-A	1	0	0	0	0
3	5-A	1	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
3	6-A	1	0	0	0	0
3	7-A	1	0	0	0	0
3	8-A	1	0	0	0	0
3	9-A	1	0	0	0	0
3	10-A	1	0	0	0	0
3	11-A	1	0	0	0	0
3	12-A	1	0	0	0	0
3	13-A	1	0	0	0	0
3	14-A	1	0	0	0	0
3	15-A	1	0	0	0	0
3	16-A	1	0	0	0	0
3	17-A	1	0	0	0	0
3	18-A	1	0	0	0	0
3	19-A	1	0	0	0	0
3	20-A	1	0	0	0	0
3	21-A	1	0	0	0	0
3	22-A	1	0	0	0	0
3	23-A	1	0	0	0	0
3	24-A	1	0	0	0	0
3	25-A	1	0	0	0	0
3	26-A	1	0	0	0	0
3	27-A	1	0	0	0	0
3	28-A	1	0	0	0	0
3	29-A	1	0	0	0	0
3	30-A	1	0	0	0	0
3	31-A	1	0	0	0	0
3	32-A	1	0	0	0	0
3	33-A	1	0	0	0	0
3	34-A	1	0	0	0	0
3	35-A	1	0	0	0	0
3	36-A	1	0	0	0	0
3	37-A	1	0	0	0	0
3	38-A	1	0	0	0	0
3	39-A	1	0	0	0	0
3	40-A	1	0	0	0	0
3	41-A	1	0	0	0	0
3	42-A	1	0	0	0	0
3	43-A	1	0	0	0	0
4	1-A	148	0	0	0	0
4	2-A	135	0	0	0	0
4	3-A	134	0	0	0	0
4	4-A	142	0	0	0	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
4	5-A	140	0	0	0	0
4	6-A	145	0	0	0	0
4	7-A	133	0	0	0	0
4	8-A	131	0	0	0	0
4	9-A	147	0	0	0	0
4	10-A	146	0	0	0	0
4	11-A	137	0	0	0	0
4	12-A	141	0	0	0	0
4	13-A	130	0	0	0	0
4	14-A	135	0	0	0	0
4	15-A	136	0	0	0	0
4	16-A	121	0	0	0	0
4	17-A	152	0	0	0	0
4	18-A	122	0	0	0	0
4	19-A	141	0	0	0	0
4	20-A	131	0	0	0	0
4	21-A	142	0	0	0	0
4	22-A	139	0	0	0	0
4	23-A	134	0	0	0	0
4	24-A	138	0	0	0	0
4	25-A	145	0	0	0	0
4	26-A	125	0	0	0	0
4	27-A	144	0	0	0	0
4	28-A	135	0	0	0	0
4	29-A	144	0	0	0	0
4	30-A	146	0	0	0	0
4	31-A	136	0	0	0	0
4	32-A	122	0	0	0	0
4	33-A	134	0	0	0	0
4	34-A	123	0	0	0	0
4	35-A	130	0	0	0	0
4	36-A	139	0	0	0	0
4	37-A	140	0	0	0	0
4	38-A	120	0	0	0	0
4	39-A	145	0	0	0	0
4	40-A	121	0	0	0	0
4	41-A	127	0	0	0	0
4	42-A	133	0	0	0	0
4	43-A	140	0	0	0	0
All	All	108877	101308	101271	0	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). Clashscore could not be calculated for this entry.

There are no clashes within the asymmetric unit.

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles

5.3.1 Protein backbone

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	1-A	304/306 (99%)	274 (90%)	21 (7%)	9 (3%)	3	0
1	2-A	304/306 (99%)	269 (88%)	15 (5%)	20 (7%)	1	0
1	3-A	304/306 (99%)	274 (90%)	20 (7%)	10 (3%)	3	0
1	4-A	304/306 (99%)	269 (88%)	20 (7%)	15 (5%)	1	0
1	5-A	304/306 (99%)	274 (90%)	21 (7%)	9 (3%)	3	0
1	6-A	304/306 (99%)	277 (91%)	12 (4%)	15 (5%)	1	0
1	7-A	304/306 (99%)	272 (90%)	21 (7%)	11 (4%)	2	0
1	8-A	304/306 (99%)	275 (90%)	15 (5%)	14 (5%)	2	0
1	9-A	304/306 (99%)	275 (90%)	17 (6%)	12 (4%)	2	0
1	10-A	304/306 (99%)	281 (92%)	13 (4%)	10 (3%)	3	0
1	11-A	304/306 (99%)	274 (90%)	19 (6%)	11 (4%)	2	0
1	12-A	304/306 (99%)	282 (93%)	17 (6%)	5 (2%)	7	1
1	13-A	304/306 (99%)	288 (95%)	13 (4%)	3 (1%)	12	2
1	14-A	304/306 (99%)	289 (95%)	9 (3%)	6 (2%)	6	0
1	15-A	304/306 (99%)	274 (90%)	16 (5%)	14 (5%)	2	0
1	16-A	304/306 (99%)	285 (94%)	10 (3%)	9 (3%)	3	0
1	17-A	304/306 (99%)	282 (93%)	16 (5%)	6 (2%)	6	0
1	18-A	304/306 (99%)	276 (91%)	19 (6%)	9 (3%)	3	0
1	19-A	304/306 (99%)	274 (90%)	19 (6%)	11 (4%)	2	0
1	20-A	304/306 (99%)	288 (95%)	8 (3%)	8 (3%)	4	0
1	21-A	304/306 (99%)	281 (92%)	12 (4%)	11 (4%)	2	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	22-A	304/306 (99%)	277 (91%)	20 (7%)	7 (2%)	5	0
1	23-A	304/306 (99%)	271 (89%)	23 (8%)	10 (3%)	3	0
1	24-A	304/306 (99%)	272 (90%)	19 (6%)	13 (4%)	2	0
1	25-A	304/306 (99%)	279 (92%)	15 (5%)	10 (3%)	3	0
1	26-A	304/306 (99%)	268 (88%)	19 (6%)	17 (6%)	1	0
1	27-A	304/306 (99%)	279 (92%)	14 (5%)	11 (4%)	2	0
1	28-A	304/306 (99%)	277 (91%)	17 (6%)	10 (3%)	3	0
1	29-A	304/306 (99%)	271 (89%)	21 (7%)	12 (4%)	2	0
1	30-A	304/306 (99%)	279 (92%)	16 (5%)	9 (3%)	3	0
1	31-A	304/306 (99%)	268 (88%)	27 (9%)	9 (3%)	3	0
1	32-A	304/306 (99%)	273 (90%)	19 (6%)	12 (4%)	2	0
1	33-A	304/306 (99%)	268 (88%)	16 (5%)	20 (7%)	1	0
1	34-A	304/306 (99%)	275 (90%)	17 (6%)	12 (4%)	2	0
1	35-A	304/306 (99%)	278 (91%)	14 (5%)	12 (4%)	2	0
1	36-A	304/306 (99%)	277 (91%)	18 (6%)	9 (3%)	3	0
1	37-A	304/306 (99%)	272 (90%)	18 (6%)	14 (5%)	2	0
1	38-A	304/306 (99%)	268 (88%)	20 (7%)	16 (5%)	1	0
1	39-A	304/306 (99%)	270 (89%)	19 (6%)	15 (5%)	1	0
1	40-A	304/306 (99%)	287 (94%)	10 (3%)	7 (2%)	5	0
1	41-A	304/306 (99%)	273 (90%)	15 (5%)	16 (5%)	1	0
1	42-A	304/306 (99%)	275 (90%)	17 (6%)	12 (4%)	2	0
1	43-A	304/306 (99%)	270 (89%)	21 (7%)	13 (4%)	2	0
All	All	13072/13158 (99%)	11860 (91%)	728 (6%)	484 (4%)	2	0

All (484) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	24	THR
1	1-A	47	GLU
1	1-A	154	TYR
1	1-A	304	THR
1	2-A	24	THR
1	2-A	45	THR
1	2-A	47	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	2-A	72	ASN
1	2-A	169	THR
1	2-A	222	ARG
1	2-A	300	CYS
1	2-A	301	SER
1	2-A	303	VAL
1	2-A	305	PHE
1	3-A	46	SER
1	3-A	60	ARG
1	3-A	71	GLY
1	3-A	276	MET
1	3-A	277	ASN
1	3-A	302	GLY
1	4-A	24	THR
1	4-A	48	ASP
1	4-A	60	ARG
1	4-A	220	LEU
1	4-A	301	SER
1	4-A	305	PHE
1	5-A	3	PHE
1	5-A	49	MET
1	5-A	142	ASN
1	5-A	155	ASP
1	5-A	303	VAL
1	6-A	24	THR
1	6-A	59	ILE
1	6-A	60	ARG
1	6-A	71	GLY
1	6-A	155	ASP
1	6-A	299	GLN
1	6-A	300	CYS
1	6-A	301	SER
1	7-A	192	GLN
1	7-A	305	PHE
1	8-A	25	THR
1	8-A	48	ASP
1	8-A	51	ASN
1	8-A	142	ASN
1	8-A	152	ILE
1	8-A	154	TYR
1	8-A	155	ASP
1	8-A	156	CYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	8-A	301	SER
1	8-A	304	THR
1	8-A	305	PHE
1	9-A	24	THR
1	9-A	154	TYR
1	9-A	301	SER
1	9-A	302	GLY
1	10-A	155	ASP
1	10-A	303	VAL
1	11-A	70	ALA
1	11-A	152	ILE
1	11-A	153	ASP
1	11-A	154	TYR
1	11-A	155	ASP
1	11-A	277	ASN
1	12-A	50	LEU
1	12-A	152	ILE
1	13-A	152	ILE
1	13-A	304	THR
1	14-A	72	ASN
1	15-A	23	GLY
1	15-A	47	GLU
1	15-A	102	LYS
1	15-A	276	MET
1	15-A	279	ARG
1	15-A	300	CYS
1	15-A	301	SER
1	15-A	303	VAL
1	15-A	304	THR
1	16-A	23	GLY
1	16-A	24	THR
1	16-A	72	ASN
1	16-A	73	VAL
1	16-A	75	LEU
1	16-A	191	ALA
1	17-A	24	THR
1	17-A	276	MET
1	17-A	279	ARG
1	18-A	51	ASN
1	18-A	70	ALA
1	18-A	72	ASN
1	18-A	153	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	301	SER
1	18-A	303	VAL
1	19-A	154	TYR
1	19-A	165	MET
1	19-A	279	ARG
1	19-A	302	GLY
1	20-A	46	SER
1	20-A	61	LYS
1	20-A	73	VAL
1	20-A	74	GLN
1	20-A	155	ASP
1	20-A	301	SER
1	21-A	23	GLY
1	21-A	25	THR
1	21-A	70	ALA
1	21-A	301	SER
1	21-A	303	VAL
1	22-A	48	ASP
1	22-A	301	SER
1	23-A	49	MET
1	23-A	300	CYS
1	23-A	302	GLY
1	23-A	303	VAL
1	23-A	305	PHE
1	24-A	25	THR
1	24-A	46	SER
1	24-A	72	ASN
1	24-A	155	ASP
1	24-A	220	LEU
1	24-A	241	PRO
1	24-A	303	VAL
1	25-A	51	ASN
1	25-A	52	PRO
1	25-A	71	GLY
1	25-A	301	SER
1	26-A	46	SER
1	26-A	47	GLU
1	26-A	59	ILE
1	26-A	72	ASN
1	26-A	73	VAL
1	26-A	120	GLY
1	26-A	154	TYR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	26-A	304	THR
1	26-A	305	PHE
1	27-A	60	ARG
1	27-A	300	CYS
1	28-A	60	ARG
1	28-A	72	ASN
1	28-A	301	SER
1	28-A	303	VAL
1	28-A	304	THR
1	28-A	305	PHE
1	29-A	60	ARG
1	29-A	119	ASN
1	29-A	273	GLN
1	29-A	274	ASN
1	29-A	298	ARG
1	29-A	299	GLN
1	29-A	301	SER
1	30-A	46	SER
1	30-A	50	LEU
1	30-A	233	VAL
1	30-A	235	MET
1	30-A	236	LYS
1	31-A	3	PHE
1	31-A	155	ASP
1	31-A	232	LEU
1	31-A	235	MET
1	31-A	301	SER
1	31-A	305	PHE
1	32-A	48	ASP
1	32-A	299	GLN
1	32-A	303	VAL
1	33-A	48	ASP
1	33-A	59	ILE
1	33-A	61	LYS
1	33-A	62	SER
1	33-A	122	PRO
1	33-A	142	ASN
1	33-A	233	VAL
1	33-A	235	MET
1	33-A	299	GLN
1	33-A	305	PHE
1	34-A	71	GLY

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	34-A	73	VAL
1	34-A	142	ASN
1	34-A	233	VAL
1	34-A	235	MET
1	34-A	303	VAL
1	35-A	50	LEU
1	35-A	141	LEU
1	35-A	154	TYR
1	35-A	155	ASP
1	35-A	233	VAL
1	35-A	234	ALA
1	35-A	235	MET
1	35-A	301	SER
1	36-A	300	CYS
1	36-A	303	VAL
1	36-A	304	THR
1	37-A	25	THR
1	37-A	193	ALA
1	37-A	300	CYS
1	37-A	303	VAL
1	37-A	304	THR
1	38-A	23	GLY
1	38-A	51	ASN
1	38-A	73	VAL
1	38-A	153	ASP
1	38-A	154	TYR
1	38-A	193	ALA
1	38-A	233	VAL
1	38-A	304	THR
1	39-A	24	THR
1	39-A	51	ASN
1	39-A	193	ALA
1	39-A	233	VAL
1	39-A	234	ALA
1	39-A	302	GLY
1	39-A	303	VAL
1	39-A	305	PHE
1	40-A	153	ASP
1	40-A	234	ALA
1	40-A	301	SER
1	40-A	303	VAL
1	41-A	47	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	41-A	48	ASP
1	41-A	71	GLY
1	41-A	220	LEU
1	41-A	232	LEU
1	41-A	233	VAL
1	41-A	236	LYS
1	41-A	301	SER
1	42-A	45	THR
1	42-A	141	LEU
1	42-A	191	ALA
1	42-A	192	GLN
1	42-A	221	ASN
1	42-A	299	GLN
1	42-A	301	SER
1	42-A	303	VAL
1	43-A	46	SER
1	43-A	49	MET
1	43-A	73	VAL
1	43-A	154	TYR
1	43-A	193	ALA
1	43-A	301	SER
1	43-A	304	THR
1	1-A	48	ASP
1	1-A	223	PHE
1	1-A	302	GLY
1	2-A	23	GLY
1	2-A	70	ALA
1	3-A	279	ARG
1	3-A	301	SER
1	4-A	47	GLU
1	5-A	24	THR
1	5-A	70	ALA
1	5-A	154	TYR
1	5-A	277	ASN
1	6-A	102	LYS
1	6-A	142	ASN
1	6-A	278	GLY
1	7-A	71	GLY
1	7-A	191	ALA
1	7-A	278	GLY
1	7-A	279	ARG
1	8-A	23	GLY

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	9-A	156	CYS
1	9-A	192	GLN
1	9-A	235	MET
1	9-A	277	ASN
1	9-A	303	VAL
1	9-A	304	THR
1	9-A	305	PHE
1	10-A	24	THR
1	10-A	301	SER
1	10-A	304	THR
1	12-A	154	TYR
1	12-A	305	PHE
1	13-A	234	ALA
1	14-A	23	GLY
1	14-A	154	TYR
1	15-A	24	THR
1	15-A	48	ASP
1	15-A	154	TYR
1	15-A	278	GLY
1	16-A	277	ASN
1	17-A	23	GLY
1	17-A	72	ASN
1	18-A	23	GLY
1	18-A	277	ASN
1	18-A	279	ARG
1	19-A	46	SER
1	21-A	24	THR
1	21-A	71	GLY
1	22-A	46	SER
1	22-A	154	TYR
1	22-A	192	GLN
1	22-A	303	VAL
1	24-A	51	ASN
1	24-A	73	VAL
1	24-A	301	SER
1	25-A	3	PHE
1	25-A	48	ASP
1	25-A	73	VAL
1	26-A	119	ASN
1	26-A	195	GLY
1	26-A	301	SER
1	27-A	72	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	27-A	142	ASN
1	27-A	301	SER
1	29-A	2	GLY
1	29-A	71	GLY
1	30-A	305	PHE
1	31-A	233	VAL
1	32-A	47	GLU
1	32-A	141	LEU
1	32-A	154	TYR
1	32-A	256	GLN
1	33-A	23	GLY
1	33-A	60	ARG
1	33-A	141	LEU
1	33-A	156	CYS
1	34-A	155	ASP
1	34-A	236	LYS
1	35-A	71	GLY
1	36-A	233	VAL
1	36-A	234	ALA
1	36-A	235	MET
1	36-A	299	GLN
1	37-A	46	SER
1	37-A	154	TYR
1	37-A	216	ASP
1	37-A	233	VAL
1	37-A	299	GLN
1	37-A	305	PHE
1	38-A	71	GLY
1	38-A	72	ASN
1	38-A	223	PHE
1	38-A	299	GLN
1	38-A	301	SER
1	38-A	303	VAL
1	39-A	301	SER
1	39-A	304	THR
1	40-A	233	VAL
1	40-A	302	GLY
1	41-A	49	MET
1	41-A	154	TYR
1	41-A	192	GLN
1	41-A	303	VAL
1	43-A	71	GLY

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	43-A	191	ALA
1	1-A	108	PRO
1	2-A	46	SER
1	2-A	73	VAL
1	2-A	153	ASP
1	2-A	168	PRO
1	2-A	233	VAL
1	3-A	154	TYR
1	4-A	3	PHE
1	4-A	154	TYR
1	6-A	277	ASN
1	7-A	153	ASP
1	10-A	45	THR
1	10-A	305	PHE
1	11-A	4	ARG
1	11-A	190	THR
1	14-A	45	THR
1	14-A	46	SER
1	14-A	152	ILE
1	15-A	46	SER
1	16-A	154	TYR
1	17-A	303	VAL
1	19-A	72	ASN
1	19-A	74	GLN
1	20-A	154	TYR
1	24-A	23	GLY
1	24-A	302	GLY
1	25-A	72	ASN
1	26-A	45	THR
1	26-A	275	GLY
1	26-A	299	GLN
1	27-A	156	CYS
1	28-A	302	GLY
1	29-A	305	PHE
1	30-A	45	THR
1	30-A	191	ALA
1	30-A	234	ALA
1	31-A	154	TYR
1	32-A	3	PHE
1	32-A	142	ASN
1	33-A	154	TYR
1	33-A	301	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	33-A	304	THR
1	34-A	192	GLN
1	34-A	234	ALA
1	36-A	142	ASN
1	37-A	47	GLU
1	38-A	305	PHE
1	39-A	154	TYR
1	39-A	195	GLY
1	41-A	141	LEU
1	41-A	304	THR
1	41-A	305	PHE
1	42-A	154	TYR
1	42-A	234	ALA
1	43-A	192	GLN
1	1-A	275	GLY
1	2-A	170	GLY
1	4-A	45	THR
1	4-A	49	MET
1	4-A	304	THR
1	6-A	154	TYR
1	9-A	70	ALA
1	20-A	60	ARG
1	21-A	277	ASN
1	23-A	145	CYS
1	23-A	277	ASN
1	25-A	195	GLY
1	26-A	3	PHE
1	28-A	48	ASP
1	28-A	154	TYR
1	29-A	297	VAL
1	32-A	51	ASN
1	33-A	123	SER
1	34-A	141	LEU
1	35-A	70	ALA
1	35-A	299	GLN
1	36-A	154	TYR
1	37-A	51	ASN
1	38-A	302	GLY
1	40-A	305	PHE
1	42-A	302	GLY
1	2-A	277	ASN
1	3-A	303	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	4-A	141	LEU
1	4-A	278	GLY
1	7-A	24	THR
1	7-A	303	VAL
1	8-A	303	VAL
1	10-A	51	ASN
1	10-A	154	TYR
1	10-A	302	GLY
1	11-A	302	GLY
1	11-A	305	PHE
1	12-A	256	GLN
1	19-A	23	GLY
1	21-A	72	ASN
1	21-A	298	ARG
1	23-A	141	LEU
1	24-A	298	ARG
1	25-A	305	PHE
1	27-A	51	ASN
1	27-A	119	ASN
1	29-A	154	TYR
1	33-A	3	PHE
1	35-A	72	ASN
1	37-A	155	ASP
1	39-A	155	ASP
1	39-A	300	CYS
1	42-A	51	ASN
1	43-A	299	GLN
1	16-A	276	MET
1	19-A	277	ASN
1	22-A	155	ASP
1	23-A	278	GLY
1	27-A	49	MET
1	27-A	70	ALA
1	27-A	154	TYR
1	28-A	152	ILE
1	31-A	2	GLY
1	32-A	233	VAL
1	33-A	191	ALA
1	39-A	153	ASP
1	43-A	23	GLY
1	43-A	277	ASN
1	4-A	108	PRO

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	7-A	52	PRO
1	26-A	71	GLY
1	32-A	2	GLY
1	21-A	73	VAL
1	34-A	302	GLY
1	11-A	23	GLY
1	19-A	51	ASN
1	23-A	71	GLY
1	41-A	302	GLY
1	2-A	171	VAL
1	6-A	106	ILE
1	6-A	303	VAL
1	7-A	23	GLY
1	8-A	71	GLY
1	19-A	71	GLY

5.3.2 Protein sidechains [i](#)

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all X-ray entries followed by that with respect to entries of similar resolution.

The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	1-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	2-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	3-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	4-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	5-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	6-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	7-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	8-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	9-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	10-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	11-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	12-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	13-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	14-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	15-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	16-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	17-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	18-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	19-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	20-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	21-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	22-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	23-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	24-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	25-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	26-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	27-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	28-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	29-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	30-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	31-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	32-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	33-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	34-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	35-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	36-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	37-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	38-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	39-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	40-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	41-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	42-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0
1	43-A	263/263 (100%)	223 (85%)	40 (15%)	3	0

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles
All	All	11309/11309 (100%)	9589 (85%)	1720 (15%)	3 0

All (1720) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	1	SER
1	1-A	27	LEU
1	1-A	45	THR
1	1-A	47	GLU
1	1-A	49	MET
1	1-A	50	LEU
1	1-A	59	ILE
1	1-A	60	ARG
1	1-A	72	ASN
1	1-A	81	SER
1	1-A	97	LYS
1	1-A	100	LYS
1	1-A	107	GLN
1	1-A	121	SER
1	1-A	125	VAL
1	1-A	139	SER
1	1-A	141	LEU
1	1-A	154	TYR
1	1-A	155	ASP
1	1-A	177	LEU
1	1-A	188	ARG
1	1-A	190	THR
1	1-A	217	ARG
1	1-A	222	ARG
1	1-A	225	THR
1	1-A	235	MET
1	1-A	254	SER
1	1-A	256	GLN
1	1-A	267	SER
1	1-A	276	MET
1	1-A	277	ASN
1	1-A	282	LEU
1	1-A	286	LEU
1	1-A	288	GLU
1	1-A	290	GLU
1	1-A	297	VAL
1	1-A	298	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	300	CYS
1	1-A	301	SER
1	1-A	306	GLN
1	2-A	1	SER
1	2-A	27	LEU
1	2-A	45	THR
1	2-A	47	GLU
1	2-A	49	MET
1	2-A	50	LEU
1	2-A	59	ILE
1	2-A	60	ARG
1	2-A	72	ASN
1	2-A	81	SER
1	2-A	97	LYS
1	2-A	100	LYS
1	2-A	107	GLN
1	2-A	121	SER
1	2-A	125	VAL
1	2-A	139	SER
1	2-A	141	LEU
1	2-A	154	TYR
1	2-A	155	ASP
1	2-A	177	LEU
1	2-A	188	ARG
1	2-A	190	THR
1	2-A	217	ARG
1	2-A	222	ARG
1	2-A	225	THR
1	2-A	235	MET
1	2-A	254	SER
1	2-A	256	GLN
1	2-A	267	SER
1	2-A	276	MET
1	2-A	277	ASN
1	2-A	282	LEU
1	2-A	286	LEU
1	2-A	288	GLU
1	2-A	290	GLU
1	2-A	297	VAL
1	2-A	298	ARG
1	2-A	300	CYS
1	2-A	301	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	2-A	306	GLN
1	3-A	1	SER
1	3-A	27	LEU
1	3-A	45	THR
1	3-A	47	GLU
1	3-A	49	MET
1	3-A	50	LEU
1	3-A	59	ILE
1	3-A	60	ARG
1	3-A	72	ASN
1	3-A	81	SER
1	3-A	97	LYS
1	3-A	100	LYS
1	3-A	107	GLN
1	3-A	121	SER
1	3-A	125	VAL
1	3-A	139	SER
1	3-A	141	LEU
1	3-A	154	TYR
1	3-A	155	ASP
1	3-A	177	LEU
1	3-A	188	ARG
1	3-A	190	THR
1	3-A	217	ARG
1	3-A	222	ARG
1	3-A	225	THR
1	3-A	235	MET
1	3-A	254	SER
1	3-A	256	GLN
1	3-A	267	SER
1	3-A	276	MET
1	3-A	277	ASN
1	3-A	282	LEU
1	3-A	286	LEU
1	3-A	288	GLU
1	3-A	290	GLU
1	3-A	297	VAL
1	3-A	298	ARG
1	3-A	300	CYS
1	3-A	301	SER
1	3-A	306	GLN
1	4-A	1	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	4-A	27	LEU
1	4-A	45	THR
1	4-A	47	GLU
1	4-A	49	MET
1	4-A	50	LEU
1	4-A	59	ILE
1	4-A	60	ARG
1	4-A	72	ASN
1	4-A	81	SER
1	4-A	97	LYS
1	4-A	100	LYS
1	4-A	107	GLN
1	4-A	121	SER
1	4-A	125	VAL
1	4-A	139	SER
1	4-A	141	LEU
1	4-A	154	TYR
1	4-A	155	ASP
1	4-A	177	LEU
1	4-A	188	ARG
1	4-A	190	THR
1	4-A	217	ARG
1	4-A	222	ARG
1	4-A	225	THR
1	4-A	235	MET
1	4-A	254	SER
1	4-A	256	GLN
1	4-A	267	SER
1	4-A	276	MET
1	4-A	277	ASN
1	4-A	282	LEU
1	4-A	286	LEU
1	4-A	288	GLU
1	4-A	290	GLU
1	4-A	297	VAL
1	4-A	298	ARG
1	4-A	300	CYS
1	4-A	301	SER
1	4-A	306	GLN
1	5-A	1	SER
1	5-A	27	LEU
1	5-A	45	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	5-A	47	GLU
1	5-A	49	MET
1	5-A	50	LEU
1	5-A	59	ILE
1	5-A	60	ARG
1	5-A	72	ASN
1	5-A	81	SER
1	5-A	97	LYS
1	5-A	100	LYS
1	5-A	107	GLN
1	5-A	121	SER
1	5-A	125	VAL
1	5-A	139	SER
1	5-A	141	LEU
1	5-A	154	TYR
1	5-A	155	ASP
1	5-A	177	LEU
1	5-A	188	ARG
1	5-A	190	THR
1	5-A	217	ARG
1	5-A	222	ARG
1	5-A	225	THR
1	5-A	235	MET
1	5-A	254	SER
1	5-A	256	GLN
1	5-A	267	SER
1	5-A	276	MET
1	5-A	277	ASN
1	5-A	282	LEU
1	5-A	286	LEU
1	5-A	288	GLU
1	5-A	290	GLU
1	5-A	297	VAL
1	5-A	298	ARG
1	5-A	300	CYS
1	5-A	301	SER
1	5-A	306	GLN
1	6-A	1	SER
1	6-A	27	LEU
1	6-A	45	THR
1	6-A	47	GLU
1	6-A	49	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	6-A	50	LEU
1	6-A	59	ILE
1	6-A	60	ARG
1	6-A	72	ASN
1	6-A	81	SER
1	6-A	97	LYS
1	6-A	100	LYS
1	6-A	107	GLN
1	6-A	121	SER
1	6-A	125	VAL
1	6-A	139	SER
1	6-A	141	LEU
1	6-A	154	TYR
1	6-A	155	ASP
1	6-A	177	LEU
1	6-A	188	ARG
1	6-A	190	THR
1	6-A	217	ARG
1	6-A	222	ARG
1	6-A	225	THR
1	6-A	235	MET
1	6-A	254	SER
1	6-A	256	GLN
1	6-A	267	SER
1	6-A	276	MET
1	6-A	277	ASN
1	6-A	282	LEU
1	6-A	286	LEU
1	6-A	288	GLU
1	6-A	290	GLU
1	6-A	297	VAL
1	6-A	298	ARG
1	6-A	300	CYS
1	6-A	301	SER
1	6-A	306	GLN
1	7-A	1	SER
1	7-A	27	LEU
1	7-A	45	THR
1	7-A	47	GLU
1	7-A	49	MET
1	7-A	50	LEU
1	7-A	59	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	7-A	60	ARG
1	7-A	72	ASN
1	7-A	81	SER
1	7-A	97	LYS
1	7-A	100	LYS
1	7-A	107	GLN
1	7-A	121	SER
1	7-A	125	VAL
1	7-A	139	SER
1	7-A	141	LEU
1	7-A	154	TYR
1	7-A	155	ASP
1	7-A	177	LEU
1	7-A	188	ARG
1	7-A	190	THR
1	7-A	217	ARG
1	7-A	222	ARG
1	7-A	225	THR
1	7-A	235	MET
1	7-A	254	SER
1	7-A	256	GLN
1	7-A	267	SER
1	7-A	276	MET
1	7-A	277	ASN
1	7-A	282	LEU
1	7-A	286	LEU
1	7-A	288	GLU
1	7-A	290	GLU
1	7-A	297	VAL
1	7-A	298	ARG
1	7-A	300	CYS
1	7-A	301	SER
1	7-A	306	GLN
1	8-A	1	SER
1	8-A	27	LEU
1	8-A	45	THR
1	8-A	47	GLU
1	8-A	49	MET
1	8-A	50	LEU
1	8-A	59	ILE
1	8-A	60	ARG
1	8-A	72	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	8-A	81	SER
1	8-A	97	LYS
1	8-A	100	LYS
1	8-A	107	GLN
1	8-A	121	SER
1	8-A	125	VAL
1	8-A	139	SER
1	8-A	141	LEU
1	8-A	154	TYR
1	8-A	155	ASP
1	8-A	177	LEU
1	8-A	188	ARG
1	8-A	190	THR
1	8-A	217	ARG
1	8-A	222	ARG
1	8-A	225	THR
1	8-A	235	MET
1	8-A	254	SER
1	8-A	256	GLN
1	8-A	267	SER
1	8-A	276	MET
1	8-A	277	ASN
1	8-A	282	LEU
1	8-A	286	LEU
1	8-A	288	GLU
1	8-A	290	GLU
1	8-A	297	VAL
1	8-A	298	ARG
1	8-A	300	CYS
1	8-A	301	SER
1	8-A	306	GLN
1	9-A	1	SER
1	9-A	27	LEU
1	9-A	45	THR
1	9-A	47	GLU
1	9-A	49	MET
1	9-A	50	LEU
1	9-A	59	ILE
1	9-A	60	ARG
1	9-A	72	ASN
1	9-A	81	SER
1	9-A	97	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	9-A	100	LYS
1	9-A	107	GLN
1	9-A	121	SER
1	9-A	125	VAL
1	9-A	139	SER
1	9-A	141	LEU
1	9-A	154	TYR
1	9-A	155	ASP
1	9-A	177	LEU
1	9-A	188	ARG
1	9-A	190	THR
1	9-A	217	ARG
1	9-A	222	ARG
1	9-A	225	THR
1	9-A	235	MET
1	9-A	254	SER
1	9-A	256	GLN
1	9-A	267	SER
1	9-A	276	MET
1	9-A	277	ASN
1	9-A	282	LEU
1	9-A	286	LEU
1	9-A	288	GLU
1	9-A	290	GLU
1	9-A	297	VAL
1	9-A	298	ARG
1	9-A	300	CYS
1	9-A	301	SER
1	9-A	306	GLN
1	10-A	1	SER
1	10-A	27	LEU
1	10-A	45	THR
1	10-A	47	GLU
1	10-A	49	MET
1	10-A	50	LEU
1	10-A	59	ILE
1	10-A	60	ARG
1	10-A	72	ASN
1	10-A	81	SER
1	10-A	97	LYS
1	10-A	100	LYS
1	10-A	107	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	10-A	121	SER
1	10-A	125	VAL
1	10-A	139	SER
1	10-A	141	LEU
1	10-A	154	TYR
1	10-A	155	ASP
1	10-A	177	LEU
1	10-A	188	ARG
1	10-A	190	THR
1	10-A	217	ARG
1	10-A	222	ARG
1	10-A	225	THR
1	10-A	235	MET
1	10-A	254	SER
1	10-A	256	GLN
1	10-A	267	SER
1	10-A	276	MET
1	10-A	277	ASN
1	10-A	282	LEU
1	10-A	286	LEU
1	10-A	288	GLU
1	10-A	290	GLU
1	10-A	297	VAL
1	10-A	298	ARG
1	10-A	300	CYS
1	10-A	301	SER
1	10-A	306	GLN
1	11-A	1	SER
1	11-A	27	LEU
1	11-A	45	THR
1	11-A	47	GLU
1	11-A	49	MET
1	11-A	50	LEU
1	11-A	59	ILE
1	11-A	60	ARG
1	11-A	72	ASN
1	11-A	81	SER
1	11-A	97	LYS
1	11-A	100	LYS
1	11-A	107	GLN
1	11-A	121	SER
1	11-A	125	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	11-A	139	SER
1	11-A	141	LEU
1	11-A	154	TYR
1	11-A	155	ASP
1	11-A	177	LEU
1	11-A	188	ARG
1	11-A	190	THR
1	11-A	217	ARG
1	11-A	222	ARG
1	11-A	225	THR
1	11-A	235	MET
1	11-A	254	SER
1	11-A	256	GLN
1	11-A	267	SER
1	11-A	276	MET
1	11-A	277	ASN
1	11-A	282	LEU
1	11-A	286	LEU
1	11-A	288	GLU
1	11-A	290	GLU
1	11-A	297	VAL
1	11-A	298	ARG
1	11-A	300	CYS
1	11-A	301	SER
1	11-A	306	GLN
1	12-A	1	SER
1	12-A	27	LEU
1	12-A	45	THR
1	12-A	47	GLU
1	12-A	49	MET
1	12-A	50	LEU
1	12-A	59	ILE
1	12-A	60	ARG
1	12-A	72	ASN
1	12-A	81	SER
1	12-A	97	LYS
1	12-A	100	LYS
1	12-A	107	GLN
1	12-A	121	SER
1	12-A	125	VAL
1	12-A	139	SER
1	12-A	141	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	12-A	154	TYR
1	12-A	155	ASP
1	12-A	177	LEU
1	12-A	188	ARG
1	12-A	190	THR
1	12-A	217	ARG
1	12-A	222	ARG
1	12-A	225	THR
1	12-A	235	MET
1	12-A	254	SER
1	12-A	256	GLN
1	12-A	267	SER
1	12-A	276	MET
1	12-A	277	ASN
1	12-A	282	LEU
1	12-A	286	LEU
1	12-A	288	GLU
1	12-A	290	GLU
1	12-A	297	VAL
1	12-A	298	ARG
1	12-A	300	CYS
1	12-A	301	SER
1	12-A	306	GLN
1	13-A	1	SER
1	13-A	27	LEU
1	13-A	45	THR
1	13-A	47	GLU
1	13-A	49	MET
1	13-A	50	LEU
1	13-A	59	ILE
1	13-A	60	ARG
1	13-A	72	ASN
1	13-A	81	SER
1	13-A	97	LYS
1	13-A	100	LYS
1	13-A	107	GLN
1	13-A	121	SER
1	13-A	125	VAL
1	13-A	139	SER
1	13-A	141	LEU
1	13-A	154	TYR
1	13-A	155	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	13-A	177	LEU
1	13-A	188	ARG
1	13-A	190	THR
1	13-A	217	ARG
1	13-A	222	ARG
1	13-A	225	THR
1	13-A	235	MET
1	13-A	254	SER
1	13-A	256	GLN
1	13-A	267	SER
1	13-A	276	MET
1	13-A	277	ASN
1	13-A	282	LEU
1	13-A	286	LEU
1	13-A	288	GLU
1	13-A	290	GLU
1	13-A	297	VAL
1	13-A	298	ARG
1	13-A	300	CYS
1	13-A	301	SER
1	13-A	306	GLN
1	14-A	1	SER
1	14-A	27	LEU
1	14-A	45	THR
1	14-A	47	GLU
1	14-A	49	MET
1	14-A	50	LEU
1	14-A	59	ILE
1	14-A	60	ARG
1	14-A	72	ASN
1	14-A	81	SER
1	14-A	97	LYS
1	14-A	100	LYS
1	14-A	107	GLN
1	14-A	121	SER
1	14-A	125	VAL
1	14-A	139	SER
1	14-A	141	LEU
1	14-A	154	TYR
1	14-A	155	ASP
1	14-A	177	LEU
1	14-A	188	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	14-A	190	THR
1	14-A	217	ARG
1	14-A	222	ARG
1	14-A	225	THR
1	14-A	235	MET
1	14-A	254	SER
1	14-A	256	GLN
1	14-A	267	SER
1	14-A	276	MET
1	14-A	277	ASN
1	14-A	282	LEU
1	14-A	286	LEU
1	14-A	288	GLU
1	14-A	290	GLU
1	14-A	297	VAL
1	14-A	298	ARG
1	14-A	300	CYS
1	14-A	301	SER
1	14-A	306	GLN
1	15-A	1	SER
1	15-A	27	LEU
1	15-A	45	THR
1	15-A	47	GLU
1	15-A	49	MET
1	15-A	50	LEU
1	15-A	59	ILE
1	15-A	60	ARG
1	15-A	72	ASN
1	15-A	81	SER
1	15-A	97	LYS
1	15-A	100	LYS
1	15-A	107	GLN
1	15-A	121	SER
1	15-A	125	VAL
1	15-A	139	SER
1	15-A	141	LEU
1	15-A	154	TYR
1	15-A	155	ASP
1	15-A	177	LEU
1	15-A	188	ARG
1	15-A	190	THR
1	15-A	217	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	15-A	222	ARG
1	15-A	225	THR
1	15-A	235	MET
1	15-A	254	SER
1	15-A	256	GLN
1	15-A	267	SER
1	15-A	276	MET
1	15-A	277	ASN
1	15-A	282	LEU
1	15-A	286	LEU
1	15-A	288	GLU
1	15-A	290	GLU
1	15-A	297	VAL
1	15-A	298	ARG
1	15-A	300	CYS
1	15-A	301	SER
1	15-A	306	GLN
1	16-A	1	SER
1	16-A	27	LEU
1	16-A	45	THR
1	16-A	47	GLU
1	16-A	49	MET
1	16-A	50	LEU
1	16-A	59	ILE
1	16-A	60	ARG
1	16-A	72	ASN
1	16-A	81	SER
1	16-A	97	LYS
1	16-A	100	LYS
1	16-A	107	GLN
1	16-A	121	SER
1	16-A	125	VAL
1	16-A	139	SER
1	16-A	141	LEU
1	16-A	154	TYR
1	16-A	155	ASP
1	16-A	177	LEU
1	16-A	188	ARG
1	16-A	190	THR
1	16-A	217	ARG
1	16-A	222	ARG
1	16-A	225	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	16-A	235	MET
1	16-A	254	SER
1	16-A	256	GLN
1	16-A	267	SER
1	16-A	276	MET
1	16-A	277	ASN
1	16-A	282	LEU
1	16-A	286	LEU
1	16-A	288	GLU
1	16-A	290	GLU
1	16-A	297	VAL
1	16-A	298	ARG
1	16-A	300	CYS
1	16-A	301	SER
1	16-A	306	GLN
1	17-A	1	SER
1	17-A	27	LEU
1	17-A	45	THR
1	17-A	47	GLU
1	17-A	49	MET
1	17-A	50	LEU
1	17-A	59	ILE
1	17-A	60	ARG
1	17-A	72	ASN
1	17-A	81	SER
1	17-A	97	LYS
1	17-A	100	LYS
1	17-A	107	GLN
1	17-A	121	SER
1	17-A	125	VAL
1	17-A	139	SER
1	17-A	141	LEU
1	17-A	154	TYR
1	17-A	155	ASP
1	17-A	177	LEU
1	17-A	188	ARG
1	17-A	190	THR
1	17-A	217	ARG
1	17-A	222	ARG
1	17-A	225	THR
1	17-A	235	MET
1	17-A	254	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	17-A	256	GLN
1	17-A	267	SER
1	17-A	276	MET
1	17-A	277	ASN
1	17-A	282	LEU
1	17-A	286	LEU
1	17-A	288	GLU
1	17-A	290	GLU
1	17-A	297	VAL
1	17-A	298	ARG
1	17-A	300	CYS
1	17-A	301	SER
1	17-A	306	GLN
1	18-A	1	SER
1	18-A	27	LEU
1	18-A	45	THR
1	18-A	47	GLU
1	18-A	49	MET
1	18-A	50	LEU
1	18-A	59	ILE
1	18-A	60	ARG
1	18-A	72	ASN
1	18-A	81	SER
1	18-A	97	LYS
1	18-A	100	LYS
1	18-A	107	GLN
1	18-A	121	SER
1	18-A	125	VAL
1	18-A	139	SER
1	18-A	141	LEU
1	18-A	154	TYR
1	18-A	155	ASP
1	18-A	177	LEU
1	18-A	188	ARG
1	18-A	190	THR
1	18-A	217	ARG
1	18-A	222	ARG
1	18-A	225	THR
1	18-A	235	MET
1	18-A	254	SER
1	18-A	256	GLN
1	18-A	267	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	18-A	276	MET
1	18-A	277	ASN
1	18-A	282	LEU
1	18-A	286	LEU
1	18-A	288	GLU
1	18-A	290	GLU
1	18-A	297	VAL
1	18-A	298	ARG
1	18-A	300	CYS
1	18-A	301	SER
1	18-A	306	GLN
1	19-A	1	SER
1	19-A	27	LEU
1	19-A	45	THR
1	19-A	47	GLU
1	19-A	49	MET
1	19-A	50	LEU
1	19-A	59	ILE
1	19-A	60	ARG
1	19-A	72	ASN
1	19-A	81	SER
1	19-A	97	LYS
1	19-A	100	LYS
1	19-A	107	GLN
1	19-A	121	SER
1	19-A	125	VAL
1	19-A	139	SER
1	19-A	141	LEU
1	19-A	154	TYR
1	19-A	155	ASP
1	19-A	177	LEU
1	19-A	188	ARG
1	19-A	190	THR
1	19-A	217	ARG
1	19-A	222	ARG
1	19-A	225	THR
1	19-A	235	MET
1	19-A	254	SER
1	19-A	256	GLN
1	19-A	267	SER
1	19-A	276	MET
1	19-A	277	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	19-A	282	LEU
1	19-A	286	LEU
1	19-A	288	GLU
1	19-A	290	GLU
1	19-A	297	VAL
1	19-A	298	ARG
1	19-A	300	CYS
1	19-A	301	SER
1	19-A	306	GLN
1	20-A	1	SER
1	20-A	27	LEU
1	20-A	45	THR
1	20-A	47	GLU
1	20-A	49	MET
1	20-A	50	LEU
1	20-A	59	ILE
1	20-A	60	ARG
1	20-A	72	ASN
1	20-A	81	SER
1	20-A	97	LYS
1	20-A	100	LYS
1	20-A	107	GLN
1	20-A	121	SER
1	20-A	125	VAL
1	20-A	139	SER
1	20-A	141	LEU
1	20-A	154	TYR
1	20-A	155	ASP
1	20-A	177	LEU
1	20-A	188	ARG
1	20-A	190	THR
1	20-A	217	ARG
1	20-A	222	ARG
1	20-A	225	THR
1	20-A	235	MET
1	20-A	254	SER
1	20-A	256	GLN
1	20-A	267	SER
1	20-A	276	MET
1	20-A	277	ASN
1	20-A	282	LEU
1	20-A	286	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	20-A	288	GLU
1	20-A	290	GLU
1	20-A	297	VAL
1	20-A	298	ARG
1	20-A	300	CYS
1	20-A	301	SER
1	20-A	306	GLN
1	21-A	1	SER
1	21-A	27	LEU
1	21-A	45	THR
1	21-A	47	GLU
1	21-A	49	MET
1	21-A	50	LEU
1	21-A	59	ILE
1	21-A	60	ARG
1	21-A	72	ASN
1	21-A	81	SER
1	21-A	97	LYS
1	21-A	100	LYS
1	21-A	107	GLN
1	21-A	121	SER
1	21-A	125	VAL
1	21-A	139	SER
1	21-A	141	LEU
1	21-A	154	TYR
1	21-A	155	ASP
1	21-A	177	LEU
1	21-A	188	ARG
1	21-A	190	THR
1	21-A	217	ARG
1	21-A	222	ARG
1	21-A	225	THR
1	21-A	235	MET
1	21-A	254	SER
1	21-A	256	GLN
1	21-A	267	SER
1	21-A	276	MET
1	21-A	277	ASN
1	21-A	282	LEU
1	21-A	286	LEU
1	21-A	288	GLU
1	21-A	290	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	21-A	297	VAL
1	21-A	298	ARG
1	21-A	300	CYS
1	21-A	301	SER
1	21-A	306	GLN
1	22-A	1	SER
1	22-A	27	LEU
1	22-A	45	THR
1	22-A	47	GLU
1	22-A	49	MET
1	22-A	50	LEU
1	22-A	59	ILE
1	22-A	60	ARG
1	22-A	72	ASN
1	22-A	81	SER
1	22-A	97	LYS
1	22-A	100	LYS
1	22-A	107	GLN
1	22-A	121	SER
1	22-A	125	VAL
1	22-A	139	SER
1	22-A	141	LEU
1	22-A	154	TYR
1	22-A	155	ASP
1	22-A	177	LEU
1	22-A	188	ARG
1	22-A	190	THR
1	22-A	217	ARG
1	22-A	222	ARG
1	22-A	225	THR
1	22-A	235	MET
1	22-A	254	SER
1	22-A	256	GLN
1	22-A	267	SER
1	22-A	276	MET
1	22-A	277	ASN
1	22-A	282	LEU
1	22-A	286	LEU
1	22-A	288	GLU
1	22-A	290	GLU
1	22-A	297	VAL
1	22-A	298	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	22-A	300	CYS
1	22-A	301	SER
1	22-A	306	GLN
1	23-A	1	SER
1	23-A	27	LEU
1	23-A	45	THR
1	23-A	47	GLU
1	23-A	49	MET
1	23-A	50	LEU
1	23-A	59	ILE
1	23-A	60	ARG
1	23-A	72	ASN
1	23-A	81	SER
1	23-A	97	LYS
1	23-A	100	LYS
1	23-A	107	GLN
1	23-A	121	SER
1	23-A	125	VAL
1	23-A	139	SER
1	23-A	141	LEU
1	23-A	154	TYR
1	23-A	155	ASP
1	23-A	177	LEU
1	23-A	188	ARG
1	23-A	190	THR
1	23-A	217	ARG
1	23-A	222	ARG
1	23-A	225	THR
1	23-A	235	MET
1	23-A	254	SER
1	23-A	256	GLN
1	23-A	267	SER
1	23-A	276	MET
1	23-A	277	ASN
1	23-A	282	LEU
1	23-A	286	LEU
1	23-A	288	GLU
1	23-A	290	GLU
1	23-A	297	VAL
1	23-A	298	ARG
1	23-A	300	CYS
1	23-A	301	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	23-A	306	GLN
1	24-A	1	SER
1	24-A	27	LEU
1	24-A	45	THR
1	24-A	47	GLU
1	24-A	49	MET
1	24-A	50	LEU
1	24-A	59	ILE
1	24-A	60	ARG
1	24-A	72	ASN
1	24-A	81	SER
1	24-A	97	LYS
1	24-A	100	LYS
1	24-A	107	GLN
1	24-A	121	SER
1	24-A	125	VAL
1	24-A	139	SER
1	24-A	141	LEU
1	24-A	154	TYR
1	24-A	155	ASP
1	24-A	177	LEU
1	24-A	188	ARG
1	24-A	190	THR
1	24-A	217	ARG
1	24-A	222	ARG
1	24-A	225	THR
1	24-A	235	MET
1	24-A	254	SER
1	24-A	256	GLN
1	24-A	267	SER
1	24-A	276	MET
1	24-A	277	ASN
1	24-A	282	LEU
1	24-A	286	LEU
1	24-A	288	GLU
1	24-A	290	GLU
1	24-A	297	VAL
1	24-A	298	ARG
1	24-A	300	CYS
1	24-A	301	SER
1	24-A	306	GLN
1	25-A	1	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	25-A	27	LEU
1	25-A	45	THR
1	25-A	47	GLU
1	25-A	49	MET
1	25-A	50	LEU
1	25-A	59	ILE
1	25-A	60	ARG
1	25-A	72	ASN
1	25-A	81	SER
1	25-A	97	LYS
1	25-A	100	LYS
1	25-A	107	GLN
1	25-A	121	SER
1	25-A	125	VAL
1	25-A	139	SER
1	25-A	141	LEU
1	25-A	154	TYR
1	25-A	155	ASP
1	25-A	177	LEU
1	25-A	188	ARG
1	25-A	190	THR
1	25-A	217	ARG
1	25-A	222	ARG
1	25-A	225	THR
1	25-A	235	MET
1	25-A	254	SER
1	25-A	256	GLN
1	25-A	267	SER
1	25-A	276	MET
1	25-A	277	ASN
1	25-A	282	LEU
1	25-A	286	LEU
1	25-A	288	GLU
1	25-A	290	GLU
1	25-A	297	VAL
1	25-A	298	ARG
1	25-A	300	CYS
1	25-A	301	SER
1	25-A	306	GLN
1	26-A	1	SER
1	26-A	27	LEU
1	26-A	45	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	26-A	47	GLU
1	26-A	49	MET
1	26-A	50	LEU
1	26-A	59	ILE
1	26-A	60	ARG
1	26-A	72	ASN
1	26-A	81	SER
1	26-A	97	LYS
1	26-A	100	LYS
1	26-A	107	GLN
1	26-A	121	SER
1	26-A	125	VAL
1	26-A	139	SER
1	26-A	141	LEU
1	26-A	154	TYR
1	26-A	155	ASP
1	26-A	177	LEU
1	26-A	188	ARG
1	26-A	190	THR
1	26-A	217	ARG
1	26-A	222	ARG
1	26-A	225	THR
1	26-A	235	MET
1	26-A	254	SER
1	26-A	256	GLN
1	26-A	267	SER
1	26-A	276	MET
1	26-A	277	ASN
1	26-A	282	LEU
1	26-A	286	LEU
1	26-A	288	GLU
1	26-A	290	GLU
1	26-A	297	VAL
1	26-A	298	ARG
1	26-A	300	CYS
1	26-A	301	SER
1	26-A	306	GLN
1	27-A	1	SER
1	27-A	27	LEU
1	27-A	45	THR
1	27-A	47	GLU
1	27-A	49	MET

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	27-A	50	LEU
1	27-A	59	ILE
1	27-A	60	ARG
1	27-A	72	ASN
1	27-A	81	SER
1	27-A	97	LYS
1	27-A	100	LYS
1	27-A	107	GLN
1	27-A	121	SER
1	27-A	125	VAL
1	27-A	139	SER
1	27-A	141	LEU
1	27-A	154	TYR
1	27-A	155	ASP
1	27-A	177	LEU
1	27-A	188	ARG
1	27-A	190	THR
1	27-A	217	ARG
1	27-A	222	ARG
1	27-A	225	THR
1	27-A	235	MET
1	27-A	254	SER
1	27-A	256	GLN
1	27-A	267	SER
1	27-A	276	MET
1	27-A	277	ASN
1	27-A	282	LEU
1	27-A	286	LEU
1	27-A	288	GLU
1	27-A	290	GLU
1	27-A	297	VAL
1	27-A	298	ARG
1	27-A	300	CYS
1	27-A	301	SER
1	27-A	306	GLN
1	28-A	1	SER
1	28-A	27	LEU
1	28-A	45	THR
1	28-A	47	GLU
1	28-A	49	MET
1	28-A	50	LEU
1	28-A	59	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	28-A	60	ARG
1	28-A	72	ASN
1	28-A	81	SER
1	28-A	97	LYS
1	28-A	100	LYS
1	28-A	107	GLN
1	28-A	121	SER
1	28-A	125	VAL
1	28-A	139	SER
1	28-A	141	LEU
1	28-A	154	TYR
1	28-A	155	ASP
1	28-A	177	LEU
1	28-A	188	ARG
1	28-A	190	THR
1	28-A	217	ARG
1	28-A	222	ARG
1	28-A	225	THR
1	28-A	235	MET
1	28-A	254	SER
1	28-A	256	GLN
1	28-A	267	SER
1	28-A	276	MET
1	28-A	277	ASN
1	28-A	282	LEU
1	28-A	286	LEU
1	28-A	288	GLU
1	28-A	290	GLU
1	28-A	297	VAL
1	28-A	298	ARG
1	28-A	300	CYS
1	28-A	301	SER
1	28-A	306	GLN
1	29-A	1	SER
1	29-A	27	LEU
1	29-A	45	THR
1	29-A	47	GLU
1	29-A	49	MET
1	29-A	50	LEU
1	29-A	59	ILE
1	29-A	60	ARG
1	29-A	72	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	29-A	81	SER
1	29-A	97	LYS
1	29-A	100	LYS
1	29-A	107	GLN
1	29-A	121	SER
1	29-A	125	VAL
1	29-A	139	SER
1	29-A	141	LEU
1	29-A	154	TYR
1	29-A	155	ASP
1	29-A	177	LEU
1	29-A	188	ARG
1	29-A	190	THR
1	29-A	217	ARG
1	29-A	222	ARG
1	29-A	225	THR
1	29-A	235	MET
1	29-A	254	SER
1	29-A	256	GLN
1	29-A	267	SER
1	29-A	276	MET
1	29-A	277	ASN
1	29-A	282	LEU
1	29-A	286	LEU
1	29-A	288	GLU
1	29-A	290	GLU
1	29-A	297	VAL
1	29-A	298	ARG
1	29-A	300	CYS
1	29-A	301	SER
1	29-A	306	GLN
1	30-A	1	SER
1	30-A	27	LEU
1	30-A	45	THR
1	30-A	47	GLU
1	30-A	49	MET
1	30-A	50	LEU
1	30-A	59	ILE
1	30-A	60	ARG
1	30-A	72	ASN
1	30-A	81	SER
1	30-A	97	LYS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	30-A	100	LYS
1	30-A	107	GLN
1	30-A	121	SER
1	30-A	125	VAL
1	30-A	139	SER
1	30-A	141	LEU
1	30-A	154	TYR
1	30-A	155	ASP
1	30-A	177	LEU
1	30-A	188	ARG
1	30-A	190	THR
1	30-A	217	ARG
1	30-A	222	ARG
1	30-A	225	THR
1	30-A	235	MET
1	30-A	254	SER
1	30-A	256	GLN
1	30-A	267	SER
1	30-A	276	MET
1	30-A	277	ASN
1	30-A	282	LEU
1	30-A	286	LEU
1	30-A	288	GLU
1	30-A	290	GLU
1	30-A	297	VAL
1	30-A	298	ARG
1	30-A	300	CYS
1	30-A	301	SER
1	30-A	306	GLN
1	31-A	1	SER
1	31-A	27	LEU
1	31-A	45	THR
1	31-A	47	GLU
1	31-A	49	MET
1	31-A	50	LEU
1	31-A	59	ILE
1	31-A	60	ARG
1	31-A	72	ASN
1	31-A	81	SER
1	31-A	97	LYS
1	31-A	100	LYS
1	31-A	107	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	31-A	121	SER
1	31-A	125	VAL
1	31-A	139	SER
1	31-A	141	LEU
1	31-A	154	TYR
1	31-A	155	ASP
1	31-A	177	LEU
1	31-A	188	ARG
1	31-A	190	THR
1	31-A	217	ARG
1	31-A	222	ARG
1	31-A	225	THR
1	31-A	235	MET
1	31-A	254	SER
1	31-A	256	GLN
1	31-A	267	SER
1	31-A	276	MET
1	31-A	277	ASN
1	31-A	282	LEU
1	31-A	286	LEU
1	31-A	288	GLU
1	31-A	290	GLU
1	31-A	297	VAL
1	31-A	298	ARG
1	31-A	300	CYS
1	31-A	301	SER
1	31-A	306	GLN
1	32-A	1	SER
1	32-A	27	LEU
1	32-A	45	THR
1	32-A	47	GLU
1	32-A	49	MET
1	32-A	50	LEU
1	32-A	59	ILE
1	32-A	60	ARG
1	32-A	72	ASN
1	32-A	81	SER
1	32-A	97	LYS
1	32-A	100	LYS
1	32-A	107	GLN
1	32-A	121	SER
1	32-A	125	VAL

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	32-A	139	SER
1	32-A	141	LEU
1	32-A	154	TYR
1	32-A	155	ASP
1	32-A	177	LEU
1	32-A	188	ARG
1	32-A	190	THR
1	32-A	217	ARG
1	32-A	222	ARG
1	32-A	225	THR
1	32-A	235	MET
1	32-A	254	SER
1	32-A	256	GLN
1	32-A	267	SER
1	32-A	276	MET
1	32-A	277	ASN
1	32-A	282	LEU
1	32-A	286	LEU
1	32-A	288	GLU
1	32-A	290	GLU
1	32-A	297	VAL
1	32-A	298	ARG
1	32-A	300	CYS
1	32-A	301	SER
1	32-A	306	GLN
1	33-A	1	SER
1	33-A	27	LEU
1	33-A	45	THR
1	33-A	47	GLU
1	33-A	49	MET
1	33-A	50	LEU
1	33-A	59	ILE
1	33-A	60	ARG
1	33-A	72	ASN
1	33-A	81	SER
1	33-A	97	LYS
1	33-A	100	LYS
1	33-A	107	GLN
1	33-A	121	SER
1	33-A	125	VAL
1	33-A	139	SER
1	33-A	141	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	33-A	154	TYR
1	33-A	155	ASP
1	33-A	177	LEU
1	33-A	188	ARG
1	33-A	190	THR
1	33-A	217	ARG
1	33-A	222	ARG
1	33-A	225	THR
1	33-A	235	MET
1	33-A	254	SER
1	33-A	256	GLN
1	33-A	267	SER
1	33-A	276	MET
1	33-A	277	ASN
1	33-A	282	LEU
1	33-A	286	LEU
1	33-A	288	GLU
1	33-A	290	GLU
1	33-A	297	VAL
1	33-A	298	ARG
1	33-A	300	CYS
1	33-A	301	SER
1	33-A	306	GLN
1	34-A	1	SER
1	34-A	27	LEU
1	34-A	45	THR
1	34-A	47	GLU
1	34-A	49	MET
1	34-A	50	LEU
1	34-A	59	ILE
1	34-A	60	ARG
1	34-A	72	ASN
1	34-A	81	SER
1	34-A	97	LYS
1	34-A	100	LYS
1	34-A	107	GLN
1	34-A	121	SER
1	34-A	125	VAL
1	34-A	139	SER
1	34-A	141	LEU
1	34-A	154	TYR
1	34-A	155	ASP

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	34-A	177	LEU
1	34-A	188	ARG
1	34-A	190	THR
1	34-A	217	ARG
1	34-A	222	ARG
1	34-A	225	THR
1	34-A	235	MET
1	34-A	254	SER
1	34-A	256	GLN
1	34-A	267	SER
1	34-A	276	MET
1	34-A	277	ASN
1	34-A	282	LEU
1	34-A	286	LEU
1	34-A	288	GLU
1	34-A	290	GLU
1	34-A	297	VAL
1	34-A	298	ARG
1	34-A	300	CYS
1	34-A	301	SER
1	34-A	306	GLN
1	35-A	1	SER
1	35-A	27	LEU
1	35-A	45	THR
1	35-A	47	GLU
1	35-A	49	MET
1	35-A	50	LEU
1	35-A	59	ILE
1	35-A	60	ARG
1	35-A	72	ASN
1	35-A	81	SER
1	35-A	97	LYS
1	35-A	100	LYS
1	35-A	107	GLN
1	35-A	121	SER
1	35-A	125	VAL
1	35-A	139	SER
1	35-A	141	LEU
1	35-A	154	TYR
1	35-A	155	ASP
1	35-A	177	LEU
1	35-A	188	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	35-A	190	THR
1	35-A	217	ARG
1	35-A	222	ARG
1	35-A	225	THR
1	35-A	235	MET
1	35-A	254	SER
1	35-A	256	GLN
1	35-A	267	SER
1	35-A	276	MET
1	35-A	277	ASN
1	35-A	282	LEU
1	35-A	286	LEU
1	35-A	288	GLU
1	35-A	290	GLU
1	35-A	297	VAL
1	35-A	298	ARG
1	35-A	300	CYS
1	35-A	301	SER
1	35-A	306	GLN
1	36-A	1	SER
1	36-A	27	LEU
1	36-A	45	THR
1	36-A	47	GLU
1	36-A	49	MET
1	36-A	50	LEU
1	36-A	59	ILE
1	36-A	60	ARG
1	36-A	72	ASN
1	36-A	81	SER
1	36-A	97	LYS
1	36-A	100	LYS
1	36-A	107	GLN
1	36-A	121	SER
1	36-A	125	VAL
1	36-A	139	SER
1	36-A	141	LEU
1	36-A	154	TYR
1	36-A	155	ASP
1	36-A	177	LEU
1	36-A	188	ARG
1	36-A	190	THR
1	36-A	217	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	36-A	222	ARG
1	36-A	225	THR
1	36-A	235	MET
1	36-A	254	SER
1	36-A	256	GLN
1	36-A	267	SER
1	36-A	276	MET
1	36-A	277	ASN
1	36-A	282	LEU
1	36-A	286	LEU
1	36-A	288	GLU
1	36-A	290	GLU
1	36-A	297	VAL
1	36-A	298	ARG
1	36-A	300	CYS
1	36-A	301	SER
1	36-A	306	GLN
1	37-A	1	SER
1	37-A	27	LEU
1	37-A	45	THR
1	37-A	47	GLU
1	37-A	49	MET
1	37-A	50	LEU
1	37-A	59	ILE
1	37-A	60	ARG
1	37-A	72	ASN
1	37-A	81	SER
1	37-A	97	LYS
1	37-A	100	LYS
1	37-A	107	GLN
1	37-A	121	SER
1	37-A	125	VAL
1	37-A	139	SER
1	37-A	141	LEU
1	37-A	154	TYR
1	37-A	155	ASP
1	37-A	177	LEU
1	37-A	188	ARG
1	37-A	190	THR
1	37-A	217	ARG
1	37-A	222	ARG
1	37-A	225	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	37-A	235	MET
1	37-A	254	SER
1	37-A	256	GLN
1	37-A	267	SER
1	37-A	276	MET
1	37-A	277	ASN
1	37-A	282	LEU
1	37-A	286	LEU
1	37-A	288	GLU
1	37-A	290	GLU
1	37-A	297	VAL
1	37-A	298	ARG
1	37-A	300	CYS
1	37-A	301	SER
1	37-A	306	GLN
1	38-A	1	SER
1	38-A	27	LEU
1	38-A	45	THR
1	38-A	47	GLU
1	38-A	49	MET
1	38-A	50	LEU
1	38-A	59	ILE
1	38-A	60	ARG
1	38-A	72	ASN
1	38-A	81	SER
1	38-A	97	LYS
1	38-A	100	LYS
1	38-A	107	GLN
1	38-A	121	SER
1	38-A	125	VAL
1	38-A	139	SER
1	38-A	141	LEU
1	38-A	154	TYR
1	38-A	155	ASP
1	38-A	177	LEU
1	38-A	188	ARG
1	38-A	190	THR
1	38-A	217	ARG
1	38-A	222	ARG
1	38-A	225	THR
1	38-A	235	MET
1	38-A	254	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	38-A	256	GLN
1	38-A	267	SER
1	38-A	276	MET
1	38-A	277	ASN
1	38-A	282	LEU
1	38-A	286	LEU
1	38-A	288	GLU
1	38-A	290	GLU
1	38-A	297	VAL
1	38-A	298	ARG
1	38-A	300	CYS
1	38-A	301	SER
1	38-A	306	GLN
1	39-A	1	SER
1	39-A	27	LEU
1	39-A	45	THR
1	39-A	47	GLU
1	39-A	49	MET
1	39-A	50	LEU
1	39-A	59	ILE
1	39-A	60	ARG
1	39-A	72	ASN
1	39-A	81	SER
1	39-A	97	LYS
1	39-A	100	LYS
1	39-A	107	GLN
1	39-A	121	SER
1	39-A	125	VAL
1	39-A	139	SER
1	39-A	141	LEU
1	39-A	154	TYR
1	39-A	155	ASP
1	39-A	177	LEU
1	39-A	188	ARG
1	39-A	190	THR
1	39-A	217	ARG
1	39-A	222	ARG
1	39-A	225	THR
1	39-A	235	MET
1	39-A	254	SER
1	39-A	256	GLN
1	39-A	267	SER

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	39-A	276	MET
1	39-A	277	ASN
1	39-A	282	LEU
1	39-A	286	LEU
1	39-A	288	GLU
1	39-A	290	GLU
1	39-A	297	VAL
1	39-A	298	ARG
1	39-A	300	CYS
1	39-A	301	SER
1	39-A	306	GLN
1	40-A	1	SER
1	40-A	27	LEU
1	40-A	45	THR
1	40-A	47	GLU
1	40-A	49	MET
1	40-A	50	LEU
1	40-A	59	ILE
1	40-A	60	ARG
1	40-A	72	ASN
1	40-A	81	SER
1	40-A	97	LYS
1	40-A	100	LYS
1	40-A	107	GLN
1	40-A	121	SER
1	40-A	125	VAL
1	40-A	139	SER
1	40-A	141	LEU
1	40-A	154	TYR
1	40-A	155	ASP
1	40-A	177	LEU
1	40-A	188	ARG
1	40-A	190	THR
1	40-A	217	ARG
1	40-A	222	ARG
1	40-A	225	THR
1	40-A	235	MET
1	40-A	254	SER
1	40-A	256	GLN
1	40-A	267	SER
1	40-A	276	MET
1	40-A	277	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	40-A	282	LEU
1	40-A	286	LEU
1	40-A	288	GLU
1	40-A	290	GLU
1	40-A	297	VAL
1	40-A	298	ARG
1	40-A	300	CYS
1	40-A	301	SER
1	40-A	306	GLN
1	41-A	1	SER
1	41-A	27	LEU
1	41-A	45	THR
1	41-A	47	GLU
1	41-A	49	MET
1	41-A	50	LEU
1	41-A	59	ILE
1	41-A	60	ARG
1	41-A	72	ASN
1	41-A	81	SER
1	41-A	97	LYS
1	41-A	100	LYS
1	41-A	107	GLN
1	41-A	121	SER
1	41-A	125	VAL
1	41-A	139	SER
1	41-A	141	LEU
1	41-A	154	TYR
1	41-A	155	ASP
1	41-A	177	LEU
1	41-A	188	ARG
1	41-A	190	THR
1	41-A	217	ARG
1	41-A	222	ARG
1	41-A	225	THR
1	41-A	235	MET
1	41-A	254	SER
1	41-A	256	GLN
1	41-A	267	SER
1	41-A	276	MET
1	41-A	277	ASN
1	41-A	282	LEU
1	41-A	286	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	41-A	288	GLU
1	41-A	290	GLU
1	41-A	297	VAL
1	41-A	298	ARG
1	41-A	300	CYS
1	41-A	301	SER
1	41-A	306	GLN
1	42-A	1	SER
1	42-A	27	LEU
1	42-A	45	THR
1	42-A	47	GLU
1	42-A	49	MET
1	42-A	50	LEU
1	42-A	59	ILE
1	42-A	60	ARG
1	42-A	72	ASN
1	42-A	81	SER
1	42-A	97	LYS
1	42-A	100	LYS
1	42-A	107	GLN
1	42-A	121	SER
1	42-A	125	VAL
1	42-A	139	SER
1	42-A	141	LEU
1	42-A	154	TYR
1	42-A	155	ASP
1	42-A	177	LEU
1	42-A	188	ARG
1	42-A	190	THR
1	42-A	217	ARG
1	42-A	222	ARG
1	42-A	225	THR
1	42-A	235	MET
1	42-A	254	SER
1	42-A	256	GLN
1	42-A	267	SER
1	42-A	276	MET
1	42-A	277	ASN
1	42-A	282	LEU
1	42-A	286	LEU
1	42-A	288	GLU
1	42-A	290	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	42-A	297	VAL
1	42-A	298	ARG
1	42-A	300	CYS
1	42-A	301	SER
1	42-A	306	GLN
1	43-A	1	SER
1	43-A	27	LEU
1	43-A	45	THR
1	43-A	47	GLU
1	43-A	49	MET
1	43-A	50	LEU
1	43-A	59	ILE
1	43-A	60	ARG
1	43-A	72	ASN
1	43-A	81	SER
1	43-A	97	LYS
1	43-A	100	LYS
1	43-A	107	GLN
1	43-A	121	SER
1	43-A	125	VAL
1	43-A	139	SER
1	43-A	141	LEU
1	43-A	154	TYR
1	43-A	155	ASP
1	43-A	177	LEU
1	43-A	188	ARG
1	43-A	190	THR
1	43-A	217	ARG
1	43-A	222	ARG
1	43-A	225	THR
1	43-A	235	MET
1	43-A	254	SER
1	43-A	256	GLN
1	43-A	267	SER
1	43-A	276	MET
1	43-A	277	ASN
1	43-A	282	LEU
1	43-A	286	LEU
1	43-A	288	GLU
1	43-A	290	GLU
1	43-A	297	VAL
1	43-A	298	ARG

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	43-A	300	CYS
1	43-A	301	SER
1	43-A	306	GLN

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (356) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	1-A	19	GLN
1	1-A	69	GLN
1	1-A	151	ASN
1	1-A	214	ASN
1	1-A	256	GLN
1	1-A	274	ASN
1	2-A	51	ASN
1	2-A	64	HIS
1	2-A	74	GLN
1	2-A	107	GLN
1	2-A	110	GLN
1	2-A	238	ASN
1	2-A	244	GLN
1	3-A	28	ASN
1	3-A	84	ASN
1	3-A	238	ASN
1	3-A	244	GLN
1	3-A	273	GLN
1	3-A	274	ASN
1	3-A	277	ASN
1	4-A	28	ASN
1	4-A	41	HIS
1	4-A	119	ASN
1	4-A	244	GLN
1	4-A	273	GLN
1	4-A	274	ASN
1	5-A	28	ASN
1	5-A	41	HIS
1	5-A	74	GLN
1	5-A	110	GLN
1	5-A	119	ASN
1	5-A	221	ASN
1	5-A	244	GLN
1	5-A	256	GLN
1	6-A	72	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	6-A	83	GLN
1	6-A	107	GLN
1	6-A	151	ASN
1	6-A	189	GLN
1	6-A	221	ASN
1	7-A	28	ASN
1	7-A	41	HIS
1	7-A	64	HIS
1	7-A	119	ASN
1	7-A	151	ASN
1	7-A	192	GLN
1	7-A	306	GLN
1	8-A	19	GLN
1	8-A	28	ASN
1	8-A	69	GLN
1	8-A	83	GLN
1	8-A	142	ASN
1	8-A	192	GLN
1	8-A	221	ASN
1	8-A	238	ASN
1	9-A	28	ASN
1	9-A	41	HIS
1	9-A	74	GLN
1	9-A	83	GLN
1	9-A	107	GLN
1	9-A	110	GLN
1	9-A	192	GLN
1	9-A	221	ASN
1	10-A	19	GLN
1	10-A	28	ASN
1	10-A	74	GLN
1	10-A	142	ASN
1	10-A	192	GLN
1	10-A	221	ASN
1	10-A	244	GLN
1	10-A	256	GLN
1	10-A	273	GLN
1	10-A	306	GLN
1	11-A	19	GLN
1	11-A	28	ASN
1	11-A	69	GLN
1	11-A	238	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	11-A	244	GLN
1	11-A	299	GLN
1	11-A	306	GLN
1	12-A	19	GLN
1	12-A	28	ASN
1	12-A	51	ASN
1	12-A	64	HIS
1	12-A	151	ASN
1	12-A	189	GLN
1	12-A	192	GLN
1	12-A	221	ASN
1	12-A	238	ASN
1	12-A	244	GLN
1	12-A	306	GLN
1	13-A	28	ASN
1	13-A	65	ASN
1	13-A	110	GLN
1	13-A	127	GLN
1	13-A	142	ASN
1	13-A	180	ASN
1	13-A	189	GLN
1	13-A	192	GLN
1	13-A	244	GLN
1	13-A	306	GLN
1	14-A	19	GLN
1	14-A	28	ASN
1	14-A	65	ASN
1	14-A	69	GLN
1	14-A	74	GLN
1	14-A	151	ASN
1	14-A	189	GLN
1	14-A	238	ASN
1	14-A	244	GLN
1	14-A	306	GLN
1	15-A	28	ASN
1	15-A	41	HIS
1	15-A	65	ASN
1	15-A	107	GLN
1	15-A	110	GLN
1	15-A	180	ASN
1	15-A	192	GLN
1	15-A	238	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	15-A	244	GLN
1	16-A	28	ASN
1	16-A	65	ASN
1	16-A	83	GLN
1	16-A	107	GLN
1	16-A	192	GLN
1	16-A	221	ASN
1	16-A	244	GLN
1	17-A	28	ASN
1	17-A	65	ASN
1	17-A	69	GLN
1	17-A	189	GLN
1	17-A	221	ASN
1	17-A	244	GLN
1	17-A	256	GLN
1	17-A	306	GLN
1	18-A	28	ASN
1	18-A	65	ASN
1	18-A	107	GLN
1	18-A	189	GLN
1	18-A	244	GLN
1	18-A	274	ASN
1	19-A	28	ASN
1	19-A	41	HIS
1	19-A	65	ASN
1	19-A	107	GLN
1	19-A	180	ASN
1	19-A	238	ASN
1	19-A	244	GLN
1	19-A	256	GLN
1	19-A	277	ASN
1	19-A	306	GLN
1	20-A	28	ASN
1	20-A	51	ASN
1	20-A	107	GLN
1	20-A	110	GLN
1	20-A	151	ASN
1	20-A	221	ASN
1	20-A	244	GLN
1	21-A	28	ASN
1	21-A	142	ASN
1	22-A	28	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	22-A	41	HIS
1	22-A	53	ASN
1	22-A	69	GLN
1	22-A	72	ASN
1	22-A	110	GLN
1	22-A	142	ASN
1	22-A	273	GLN
1	22-A	274	ASN
1	23-A	28	ASN
1	23-A	53	ASN
1	23-A	69	GLN
1	23-A	72	ASN
1	23-A	74	GLN
1	23-A	214	ASN
1	23-A	238	ASN
1	23-A	273	GLN
1	24-A	41	HIS
1	24-A	53	ASN
1	24-A	84	ASN
1	24-A	107	GLN
1	24-A	180	ASN
1	24-A	238	ASN
1	25-A	28	ASN
1	25-A	83	GLN
1	25-A	107	GLN
1	25-A	119	ASN
1	25-A	189	GLN
1	25-A	221	ASN
1	25-A	228	ASN
1	25-A	244	GLN
1	26-A	19	GLN
1	26-A	28	ASN
1	26-A	83	GLN
1	26-A	110	GLN
1	26-A	151	ASN
1	26-A	238	ASN
1	26-A	244	GLN
1	27-A	19	GLN
1	27-A	28	ASN
1	27-A	51	ASN
1	27-A	74	GLN
1	27-A	110	GLN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	27-A	119	ASN
1	27-A	151	ASN
1	27-A	189	GLN
1	27-A	244	GLN
1	28-A	28	ASN
1	28-A	72	ASN
1	28-A	83	GLN
1	28-A	110	GLN
1	28-A	142	ASN
1	28-A	151	ASN
1	28-A	189	GLN
1	28-A	214	ASN
1	28-A	221	ASN
1	28-A	244	GLN
1	28-A	277	ASN
1	29-A	28	ASN
1	29-A	69	GLN
1	29-A	72	ASN
1	29-A	83	GLN
1	29-A	107	GLN
1	29-A	151	ASN
1	29-A	228	ASN
1	29-A	299	GLN
1	30-A	28	ASN
1	30-A	41	HIS
1	30-A	64	HIS
1	30-A	107	GLN
1	30-A	110	GLN
1	30-A	214	ASN
1	30-A	221	ASN
1	30-A	228	ASN
1	30-A	273	GLN
1	30-A	299	GLN
1	30-A	306	GLN
1	31-A	28	ASN
1	31-A	64	HIS
1	31-A	74	GLN
1	31-A	110	GLN
1	31-A	214	ASN
1	31-A	221	ASN
1	31-A	228	ASN
1	32-A	28	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	32-A	74	GLN
1	32-A	83	GLN
1	32-A	119	ASN
1	32-A	228	ASN
1	32-A	256	GLN
1	33-A	28	ASN
1	33-A	64	HIS
1	33-A	65	ASN
1	33-A	69	GLN
1	33-A	74	GLN
1	33-A	107	GLN
1	33-A	110	GLN
1	33-A	151	ASN
1	33-A	180	ASN
1	33-A	214	ASN
1	33-A	228	ASN
1	33-A	244	GLN
1	34-A	28	ASN
1	34-A	41	HIS
1	34-A	51	ASN
1	34-A	119	ASN
1	34-A	214	ASN
1	34-A	228	ASN
1	34-A	277	ASN
1	35-A	28	ASN
1	35-A	119	ASN
1	35-A	151	ASN
1	35-A	214	ASN
1	35-A	228	ASN
1	35-A	244	GLN
1	36-A	19	GLN
1	36-A	28	ASN
1	36-A	51	ASN
1	36-A	74	GLN
1	36-A	110	GLN
1	36-A	142	ASN
1	36-A	151	ASN
1	36-A	214	ASN
1	36-A	228	ASN
1	37-A	28	ASN
1	37-A	41	HIS
1	37-A	64	HIS

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	37-A	74	GLN
1	37-A	119	ASN
1	37-A	142	ASN
1	37-A	151	ASN
1	37-A	180	ASN
1	37-A	189	GLN
1	37-A	214	ASN
1	37-A	228	ASN
1	37-A	244	GLN
1	38-A	19	GLN
1	38-A	28	ASN
1	38-A	41	HIS
1	38-A	72	ASN
1	38-A	214	ASN
1	38-A	221	ASN
1	38-A	228	ASN
1	38-A	244	GLN
1	39-A	28	ASN
1	39-A	69	GLN
1	39-A	107	GLN
1	39-A	110	GLN
1	39-A	142	ASN
1	39-A	151	ASN
1	39-A	214	ASN
1	39-A	228	ASN
1	39-A	244	GLN
1	39-A	256	GLN
1	39-A	306	GLN
1	40-A	19	GLN
1	40-A	28	ASN
1	40-A	72	ASN
1	40-A	83	GLN
1	40-A	107	GLN
1	40-A	119	ASN
1	40-A	142	ASN
1	40-A	151	ASN
1	40-A	180	ASN
1	40-A	214	ASN
1	40-A	228	ASN
1	40-A	256	GLN
1	40-A	306	GLN
1	41-A	28	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	41-A	51	ASN
1	41-A	151	ASN
1	41-A	180	ASN
1	41-A	214	ASN
1	41-A	221	ASN
1	41-A	228	ASN
1	41-A	244	GLN
1	41-A	256	GLN
1	41-A	306	GLN
1	42-A	19	GLN
1	42-A	28	ASN
1	42-A	72	ASN
1	42-A	110	GLN
1	42-A	142	ASN
1	42-A	151	ASN
1	42-A	180	ASN
1	42-A	274	ASN
1	42-A	299	GLN
1	43-A	28	ASN
1	43-A	51	ASN
1	43-A	110	GLN
1	43-A	151	ASN
1	43-A	214	ASN
1	43-A	228	ASN
1	43-A	244	GLN
1	43-A	277	ASN
1	43-A	306	GLN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains ⓘ

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

5.5 Carbohydrates ⓘ

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry

Of 344 ligands modelled in this entry, 43 are monoatomic - leaving 301 for Mogul analysis.

In the following table, the Counts columns list the number of bonds (or angles) for which Mogul statistics could be retrieved, the number of bonds (or angles) that are observed in the model and the number of bonds (or angles) that are defined in the Chemical Component Dictionary. The Link column lists molecule types, if any, to which the group is linked. The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 2$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	DMS	29-A	402	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	1.60	1 (33%)
2	DMS	32-A	406	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	1.72	1 (33%)
2	DMS	17-A	407	-	3,3,3	0.86	0	3,3,3	2.54	2 (66%)
2	DMS	41-A	402	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	1.41	1 (33%)
2	DMS	27-A	401	-	3,3,3	0.52	0	3,3,3	0.51	0
2	DMS	33-A	405	-	3,3,3	0.79	0	3,3,3	1.21	0
2	DMS	30-A	404	-	3,3,3	0.64	0	3,3,3	0.92	0
2	DMS	6-A	407	-	3,3,3	0.91	0	3,3,3	1.12	0
2	DMS	23-A	403	-	3,3,3	0.62	0	3,3,3	1.16	0
2	DMS	11-A	407	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	1.19	0
2	DMS	25-A	407	-	3,3,3	0.99	0	3,3,3	1.17	0
2	DMS	16-A	406	-	3,3,3	0.99	0	3,3,3	0.50	0
2	DMS	20-A	407	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	0.98	0
2	DMS	10-A	401	-	3,3,3	0.61	0	3,3,3	1.05	0
2	DMS	41-A	405	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	1.90	1 (33%)
2	DMS	30-A	406	-	3,3,3	0.87	0	3,3,3	0.27	0
2	DMS	32-A	404	-	3,3,3	0.65	0	3,3,3	2.43	2 (66%)
2	DMS	22-A	405	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	1.62	1 (33%)
2	DMS	36-A	404	-	3,3,3	0.84	0	3,3,3	2.20	2 (66%)
2	DMS	37-A	406	-	3,3,3	0.86	0	3,3,3	1.22	0
2	DMS	9-A	407	-	3,3,3	0.72	0	3,3,3	0.86	0
2	DMS	10-A	402	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	2.60	2 (66%)
2	DMS	26-A	401	-	3,3,3	0.49	0	3,3,3	1.53	1 (33%)
2	DMS	20-A	406	-	3,3,3	0.83	0	3,3,3	0.38	0
2	DMS	6-A	401	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	2.62	2 (66%)
2	DMS	14-A	407	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	1.40	0
2	DMS	13-A	402	-	3,3,3	0.85	0	3,3,3	1.46	0
2	DMS	16-A	401	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	0.90	0
2	DMS	17-A	405	-	3,3,3	0.72	0	3,3,3	1.29	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	DMS	31-A	407	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	1.56	1 (33%)
2	DMS	32-A	407	-	3,3,3	0.90	0	3,3,3	0.96	0
2	DMS	9-A	404	-	3,3,3	0.78	0	3,3,3	0.53	0
2	DMS	21-A	402	-	3,3,3	0.78	0	3,3,3	1.73	1 (33%)
2	DMS	25-A	403	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	0.82	0
2	DMS	27-A	405	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	1.23	0
2	DMS	43-A	404	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	0.74	0
2	DMS	42-A	405	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	0.84	0
2	DMS	20-A	401	-	3,3,3	0.45	0	3,3,3	0.68	0
2	DMS	23-A	402	-	3,3,3	0.89	0	3,3,3	2.51	3 (100%)
2	DMS	14-A	406	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	1.01	0
2	DMS	6-A	404	-	3,3,3	0.87	0	3,3,3	0.86	0
2	DMS	39-A	406	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	1.55	0
2	DMS	2-A	407	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	1.69	1 (33%)
2	DMS	11-A	404	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	1.56	1 (33%)
2	DMS	8-A	407	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	1.96	2 (66%)
2	DMS	12-A	407	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	0.85	0
2	DMS	16-A	407	-	3,3,3	0.63	0	3,3,3	1.88	1 (33%)
2	DMS	22-A	407	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	1.21	0
2	DMS	9-A	406	-	3,3,3	0.72	0	3,3,3	1.02	0
2	DMS	36-A	403	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	1.68	1 (33%)
2	DMS	35-A	403	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	1.23	0
2	DMS	24-A	402	-	3,3,3	0.79	0	3,3,3	1.62	1 (33%)
2	DMS	34-A	401	-	3,3,3	0.85	0	3,3,3	1.07	0
2	DMS	11-A	402	-	3,3,3	0.86	0	3,3,3	0.49	0
2	DMS	4-A	404	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	3.04	3 (100%)
2	DMS	33-A	404	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	1.89	1 (33%)
2	DMS	38-A	404	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	1.35	0
2	DMS	25-A	406	-	3,3,3	0.94	0	3,3,3	1.38	1 (33%)
2	DMS	43-A	405	-	3,3,3	0.56	0	3,3,3	1.21	1 (33%)
2	DMS	25-A	404	-	3,3,3	0.83	0	3,3,3	3.05	1 (33%)
2	DMS	42-A	407	-	3,3,3	0.62	0	3,3,3	1.68	1 (33%)
2	DMS	3-A	407	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	1.64	1 (33%)
2	DMS	40-A	403	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	2.02	1 (33%)
2	DMS	21-A	401	-	3,3,3	0.62	0	3,3,3	0.36	0
2	DMS	31-A	404	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	2.45	2 (66%)
2	DMS	28-A	404	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	1.46	1 (33%)
2	DMS	13-A	405	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	1.59	1 (33%)

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	DMS	34-A	403	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	1.89	1 (33%)
2	DMS	19-A	405	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	1.10	0
2	DMS	29-A	407	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	2.37	2 (66%)
2	DMS	19-A	401	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	0.56	0
2	DMS	25-A	402	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	1.82	1 (33%)
2	DMS	40-A	402	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	0.48	0
2	DMS	21-A	406	-	3,3,3	0.79	0	3,3,3	1.47	0
2	DMS	18-A	401	-	3,3,3	0.59	0	3,3,3	0.21	0
2	DMS	31-A	402	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	2.57	2 (66%)
2	DMS	7-A	407	-	3,3,3	0.79	0	3,3,3	1.05	0
2	DMS	4-A	403	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	0.56	0
2	DMS	33-A	403	-	3,3,3	0.95	0	3,3,3	2.66	1 (33%)
2	DMS	28-A	402	-	3,3,3	0.95	0	3,3,3	2.23	1 (33%)
2	DMS	8-A	404	-	3,3,3	0.86	0	3,3,3	1.60	1 (33%)
2	DMS	12-A	404	-	3,3,3	0.82	0	3,3,3	2.10	2 (66%)
2	DMS	1-A	407	-	3,3,3	0.63	0	3,3,3	1.30	1 (33%)
2	DMS	2-A	405	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	2.10	1 (33%)
2	DMS	31-A	406	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	0.29	0
2	DMS	28-A	407	-	3,3,3	0.62	0	3,3,3	0.66	0
2	DMS	5-A	402	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	1.68	1 (33%)
2	DMS	40-A	406	-	3,3,3	0.79	0	3,3,3	1.08	0
2	DMS	35-A	405	-	3,3,3	0.65	0	3,3,3	1.79	1 (33%)
2	DMS	5-A	404	-	3,3,3	0.50	0	3,3,3	2.14	2 (66%)
2	DMS	12-A	402	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	2.45	3 (100%)
2	DMS	34-A	404	-	3,3,3	0.59	0	3,3,3	1.53	1 (33%)
2	DMS	2-A	406	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	1.94	1 (33%)
2	DMS	8-A	406	-	3,3,3	0.65	0	3,3,3	1.42	1 (33%)
2	DMS	12-A	406	-	3,3,3	0.84	0	3,3,3	2.21	1 (33%)
2	DMS	27-A	407	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	1.05	0
2	DMS	17-A	403	-	3,3,3	0.87	0	3,3,3	1.34	0
2	DMS	43-A	407	-	3,3,3	0.60	0	3,3,3	1.28	1 (33%)
2	DMS	22-A	406	-	3,3,3	0.82	0	3,3,3	1.08	0
2	DMS	21-A	405	-	3,3,3	0.48	0	3,3,3	0.92	0
2	DMS	41-A	401	-	3,3,3	0.63	0	3,3,3	1.01	0
2	DMS	4-A	401	-	3,3,3	0.78	0	3,3,3	2.07	1 (33%)
2	DMS	10-A	407	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	0.77	0
2	DMS	19-A	403	-	3,3,3	0.61	0	3,3,3	0.47	0
2	DMS	27-A	406	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	2.94	1 (33%)

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	DMS	27-A	403	-	3,3,3	0.88	0	3,3,3	1.18	0
2	DMS	3-A	403	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	0.85	0
2	DMS	18-A	405	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	1.55	1 (33%)
2	DMS	37-A	405	-	3,3,3	0.87	0	3,3,3	1.35	0
2	DMS	42-A	406	-	3,3,3	0.57	0	3,3,3	0.42	0
2	DMS	9-A	402	-	3,3,3	0.82	0	3,3,3	1.62	1 (33%)
2	DMS	38-A	407	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	1.98	1 (33%)
2	DMS	3-A	406	-	3,3,3	0.79	0	3,3,3	2.53	3 (100%)
2	DMS	13-A	404	-	3,3,3	0.91	0	3,3,3	1.46	0
2	DMS	1-A	401	-	3,3,3	0.65	0	3,3,3	1.38	1 (33%)
2	DMS	26-A	406	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	0.63	0
2	DMS	32-A	403	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	1.41	0
2	DMS	7-A	406	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	0.48	0
2	DMS	24-A	401	-	3,3,3	0.42	0	3,3,3	0.67	0
2	DMS	17-A	402	-	3,3,3	0.91	0	3,3,3	0.74	0
2	DMS	27-A	404	-	3,3,3	1.01	0	3,3,3	2.50	1 (33%)
2	DMS	39-A	404	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	0.77	0
2	DMS	5-A	401	-	3,3,3	0.70	0	3,3,3	1.51	1 (33%)
2	DMS	3-A	404	-	3,3,3	0.90	0	3,3,3	0.81	0
2	DMS	23-A	405	-	3,3,3	0.91	0	3,3,3	0.73	0
2	DMS	3-A	401	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	0.61	0
2	DMS	28-A	406	-	3,3,3	0.90	0	3,3,3	0.70	0
2	DMS	41-A	406	-	3,3,3	0.59	0	3,3,3	1.09	0
2	DMS	12-A	403	-	3,3,3	0.88	0	3,3,3	0.94	0
2	DMS	38-A	405	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	1.47	1 (33%)
2	DMS	15-A	405	-	3,3,3	0.84	0	3,3,3	0.62	0
2	DMS	35-A	404	-	3,3,3	0.65	0	3,3,3	1.01	0
2	DMS	15-A	401	-	3,3,3	0.59	0	3,3,3	1.86	1 (33%)
2	DMS	39-A	405	-	3,3,3	0.83	0	3,3,3	1.90	1 (33%)
2	DMS	3-A	402	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	0.96	0
2	DMS	40-A	407	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	3.37	2 (66%)
2	DMS	21-A	404	-	3,3,3	0.55	0	3,3,3	1.22	0
2	DMS	14-A	403	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	1.72	1 (33%)
2	DMS	36-A	401	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	0.72	0
2	DMS	43-A	406	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	1.58	1 (33%)
2	DMS	1-A	406	-	3,3,3	0.94	0	3,3,3	1.37	1 (33%)
2	DMS	30-A	405	-	3,3,3	0.88	0	3,3,3	0.74	0
2	DMS	34-A	407	-	3,3,3	0.96	0	3,3,3	1.26	0
2	DMS	35-A	402	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	1.27	0
2	DMS	11-A	401	-	3,3,3	0.56	0	3,3,3	0.91	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	DMS	10-A	406	-	3,3,3	0.78	0	3,3,3	1.37	0
2	DMS	41-A	407	-	3,3,3	0.87	0	3,3,3	1.35	1 (33%)
2	DMS	8-A	402	-	3,3,3	0.70	0	3,3,3	1.28	0
2	DMS	39-A	407	-	3,3,3	0.79	0	3,3,3	2.33	1 (33%)
2	DMS	32-A	405	-	3,3,3	0.58	0	3,3,3	1.26	1 (33%)
2	DMS	32-A	402	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	1.33	0
2	DMS	16-A	403	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	1.48	1 (33%)
2	DMS	26-A	405	-	3,3,3	0.72	0	3,3,3	2.03	1 (33%)
2	DMS	2-A	404	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	0.89	0
2	DMS	16-A	402	-	3,3,3	0.60	0	3,3,3	1.27	1 (33%)
2	DMS	37-A	407	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	1.82	1 (33%)
2	DMS	30-A	401	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	1.91	1 (33%)
2	DMS	39-A	403	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	1.04	0
2	DMS	18-A	407	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	0.50	0
2	DMS	16-A	404	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	2.81	1 (33%)
2	DMS	10-A	405	-	3,3,3	0.57	0	3,3,3	0.64	0
2	DMS	14-A	404	-	3,3,3	0.72	0	3,3,3	1.41	1 (33%)
2	DMS	11-A	406	-	3,3,3	0.85	0	3,3,3	1.11	0
2	DMS	14-A	401	-	3,3,3	0.56	0	3,3,3	0.92	0
2	DMS	2-A	402	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	1.82	1 (33%)
2	DMS	29-A	406	-	3,3,3	0.64	0	3,3,3	0.52	0
2	DMS	40-A	401	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	0.44	0
2	DMS	30-A	402	-	3,3,3	0.79	0	3,3,3	1.07	0
2	DMS	39-A	401	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	1.53	1 (33%)
2	DMS	31-A	401	-	3,3,3	1.12	0	3,3,3	1.57	1 (33%)
2	DMS	42-A	402	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	1.45	0
2	DMS	9-A	403	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	0.73	0
2	DMS	9-A	405	-	3,3,3	0.90	0	3,3,3	1.17	0
2	DMS	28-A	405	-	3,3,3	0.61	0	3,3,3	1.01	0
2	DMS	37-A	403	-	3,3,3	0.65	0	3,3,3	0.31	0
2	DMS	17-A	406	-	3,3,3	0.87	0	3,3,3	1.76	1 (33%)
2	DMS	14-A	402	-	3,3,3	0.63	0	3,3,3	0.88	0
2	DMS	6-A	406	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	1.04	0
2	DMS	19-A	407	-	3,3,3	0.82	0	3,3,3	3.14	1 (33%)
2	DMS	37-A	401	-	3,3,3	0.97	0	3,3,3	0.33	0
2	DMS	20-A	405	-	3,3,3	0.87	0	3,3,3	2.22	1 (33%)
2	DMS	6-A	403	-	3,3,3	0.65	0	3,3,3	0.26	0
2	DMS	9-A	401	-	3,3,3	0.55	0	3,3,3	1.85	1 (33%)
2	DMS	8-A	401	-	3,3,3	0.91	0	3,3,3	0.94	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	DMS	41-A	404	-	3,3,3	0.99	0	3,3,3	1.27	0
2	DMS	22-A	404	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	0.79	0
2	DMS	7-A	402	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	1.20	0
2	DMS	34-A	402	-	3,3,3	0.85	0	3,3,3	0.11	0
2	DMS	22-A	401	-	3,3,3	0.55	0	3,3,3	0.98	0
2	DMS	5-A	406	-	3,3,3	0.61	0	3,3,3	1.01	0
2	DMS	35-A	407	-	3,3,3	0.91	0	3,3,3	1.18	0
2	DMS	38-A	402	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	0.86	0
2	DMS	7-A	404	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	1.57	0
2	DMS	5-A	403	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	1.61	1 (33%)
2	DMS	34-A	406	-	3,3,3	0.91	0	3,3,3	1.45	0
2	DMS	1-A	404	-	3,3,3	0.62	0	3,3,3	0.95	0
2	DMS	23-A	406	-	3,3,3	0.83	0	3,3,3	1.03	0
2	DMS	33-A	406	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	1.69	1 (33%)
2	DMS	37-A	404	-	3,3,3	0.51	0	3,3,3	1.30	1 (33%)
2	DMS	4-A	405	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	1.08	0
2	DMS	4-A	402	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	0.69	0
2	DMS	18-A	404	-	3,3,3	0.48	0	3,3,3	1.50	1 (33%)
2	DMS	42-A	404	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	0.91	0
2	DMS	42-A	401	-	3,3,3	0.87	0	3,3,3	1.51	1 (33%)
2	DMS	11-A	405	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	2.09	1 (33%)
2	DMS	24-A	405	-	3,3,3	0.65	0	3,3,3	0.93	0
2	DMS	40-A	405	-	3,3,3	0.89	0	3,3,3	0.93	0
2	DMS	27-A	402	-	3,3,3	0.85	0	3,3,3	2.10	1 (33%)
2	DMS	43-A	402	-	3,3,3	0.84	0	3,3,3	3.04	2 (66%)
2	DMS	26-A	403	-	3,3,3	0.88	0	3,3,3	0.75	0
2	DMS	31-A	403	-	3,3,3	0.66	0	3,3,3	1.41	1 (33%)
2	DMS	1-A	402	-	3,3,3	0.84	0	3,3,3	0.50	0
2	DMS	18-A	402	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	1.51	0
2	DMS	35-A	401	-	3,3,3	0.93	0	3,3,3	1.60	0
2	DMS	18-A	403	-	3,3,3	0.89	0	3,3,3	2.24	1 (33%)
2	DMS	29-A	405	-	3,3,3	0.62	0	3,3,3	0.49	0
2	DMS	19-A	404	-	3,3,3	0.84	0	3,3,3	0.19	0
2	DMS	7-A	405	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	1.02	0
2	DMS	6-A	405	-	3,3,3	0.92	0	3,3,3	1.09	0
2	DMS	18-A	406	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	0.97	0
2	DMS	24-A	407	-	3,3,3	0.64	0	3,3,3	1.21	0
2	DMS	2-A	403	-	3,3,3	0.65	0	3,3,3	1.16	0
2	DMS	8-A	403	-	3,3,3	0.79	0	3,3,3	0.68	0
2	DMS	25-A	405	-	3,3,3	0.87	0	3,3,3	0.68	0

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	DMS	25-A	401	-	3,3,3	0.78	0	3,3,3	1.76	1 (33%)
2	DMS	12-A	405	-	3,3,3	0.52	0	3,3,3	1.10	0
2	DMS	26-A	402	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	1.53	0
2	DMS	22-A	403	-	3,3,3	0.63	0	3,3,3	1.65	1 (33%)
2	DMS	19-A	406	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	0.97	0
2	DMS	28-A	401	-	3,3,3	0.82	0	3,3,3	1.13	0
2	DMS	23-A	401	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	0.70	0
2	DMS	5-A	405	-	3,3,3	0.54	0	3,3,3	1.42	1 (33%)
2	DMS	26-A	404	-	3,3,3	0.55	0	3,3,3	1.90	1 (33%)
2	DMS	1-A	403	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	1.19	0
2	DMS	10-A	403	-	3,3,3	0.60	0	3,3,3	2.06	2 (66%)
2	DMS	34-A	405	-	3,3,3	0.87	0	3,3,3	1.76	1 (33%)
2	DMS	36-A	407	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	1.51	1 (33%)
2	DMS	42-A	403	-	3,3,3	0.72	0	3,3,3	1.43	1 (33%)
2	DMS	43-A	401	-	3,3,3	0.83	0	3,3,3	0.64	0
2	DMS	21-A	407	-	3,3,3	0.79	0	3,3,3	1.66	1 (33%)
2	DMS	6-A	402	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	0.98	0
2	DMS	13-A	401	-	3,3,3	0.60	0	3,3,3	0.42	0
2	DMS	20-A	402	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	2.03	1 (33%)
2	DMS	35-A	406	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	0.57	0
2	DMS	41-A	403	-	3,3,3	0.67	0	3,3,3	0.79	0
2	DMS	36-A	406	-	3,3,3	0.86	0	3,3,3	1.27	1 (33%)
2	DMS	15-A	407	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	2.02	1 (33%)
2	DMS	39-A	402	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	3.24	3 (100%)
2	DMS	20-A	403	-	3,3,3	0.83	0	3,3,3	1.84	1 (33%)
2	DMS	8-A	405	-	3,3,3	0.84	0	3,3,3	2.81	2 (66%)
2	DMS	13-A	406	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	1.23	0
2	DMS	24-A	404	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	1.21	0
2	DMS	30-A	407	-	3,3,3	0.87	0	3,3,3	1.39	1 (33%)
2	DMS	4-A	407	-	3,3,3	0.81	0	3,3,3	1.52	1 (33%)
2	DMS	33-A	407	-	3,3,3	0.60	0	3,3,3	0.64	0
2	DMS	13-A	403	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	2.70	2 (66%)
2	DMS	10-A	404	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	0.26	0
2	DMS	28-A	403	-	3,3,3	0.72	0	3,3,3	0.70	0
2	DMS	40-A	404	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	0.57	0
2	DMS	24-A	403	-	3,3,3	0.71	0	3,3,3	1.52	0
2	DMS	5-A	407	-	3,3,3	0.98	0	3,3,3	0.87	0
2	DMS	1-A	405	-	3,3,3	0.64	0	3,3,3	1.67	1 (33%)

Mol	Type	Chain	Res	Link	Bond lengths			Bond angles		
					Counts	RMSZ	# Z > 2	Counts	RMSZ	# Z > 2
2	DMS	17-A	401	-	3,3,3	0.70	0	3,3,3	2.09	1 (33%)
2	DMS	24-A	406	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	1.09	0
2	DMS	4-A	406	-	3,3,3	0.82	0	3,3,3	0.92	0
2	DMS	2-A	401	-	3,3,3	0.79	0	3,3,3	0.86	0
2	DMS	23-A	407	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	1.84	1 (33%)
2	DMS	43-A	403	-	3,3,3	0.70	0	3,3,3	0.68	0
2	DMS	26-A	407	-	3,3,3	0.72	0	3,3,3	1.55	1 (33%)
2	DMS	20-A	404	-	3,3,3	0.74	0	3,3,3	0.44	0
2	DMS	3-A	405	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	1.50	1 (33%)
2	DMS	15-A	403	-	3,3,3	0.79	0	3,3,3	2.37	1 (33%)
2	DMS	38-A	401	-	3,3,3	0.86	0	3,3,3	2.44	1 (33%)
2	DMS	29-A	403	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	1.95	1 (33%)
2	DMS	7-A	403	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	1.77	1 (33%)
2	DMS	33-A	402	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	0.52	0
2	DMS	37-A	402	-	3,3,3	0.78	0	3,3,3	0.53	0
2	DMS	38-A	406	-	3,3,3	0.78	0	3,3,3	1.28	1 (33%)
2	DMS	11-A	403	-	3,3,3	0.99	0	3,3,3	2.11	1 (33%)
2	DMS	7-A	401	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	1.18	0
2	DMS	33-A	401	-	3,3,3	0.64	0	3,3,3	1.76	1 (33%)
2	DMS	38-A	403	-	3,3,3	0.55	0	3,3,3	0.90	0
2	DMS	19-A	402	-	3,3,3	0.88	0	3,3,3	0.40	0
2	DMS	21-A	403	-	3,3,3	0.99	0	3,3,3	1.24	0
2	DMS	31-A	405	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	0.88	0
2	DMS	22-A	402	-	3,3,3	0.84	0	3,3,3	1.74	0
2	DMS	29-A	401	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	0.45	0
2	DMS	15-A	406	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	1.15	0
2	DMS	32-A	401	-	3,3,3	0.85	0	3,3,3	1.30	0
2	DMS	13-A	407	-	3,3,3	0.76	0	3,3,3	1.01	0
2	DMS	15-A	404	-	3,3,3	0.70	0	3,3,3	2.05	1 (33%)
2	DMS	30-A	403	-	3,3,3	0.68	0	3,3,3	1.19	0
2	DMS	29-A	404	-	3,3,3	0.49	0	3,3,3	1.39	0
2	DMS	17-A	404	-	3,3,3	0.80	0	3,3,3	2.49	1 (33%)
2	DMS	36-A	405	-	3,3,3	0.73	0	3,3,3	0.57	0
2	DMS	23-A	404	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	0.86	0
2	DMS	36-A	402	-	3,3,3	0.75	0	3,3,3	1.65	1 (33%)
2	DMS	12-A	401	-	3,3,3	0.83	0	3,3,3	0.99	0
2	DMS	16-A	405	-	3,3,3	0.69	0	3,3,3	0.82	0
2	DMS	15-A	402	-	3,3,3	0.77	0	3,3,3	1.58	1 (33%)
2	DMS	14-A	405	-	3,3,3	0.72	0	3,3,3	1.27	0

There are no bond length outliers.

All (153) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	25-A	404	DMS	O-S-C2	5.16	132.31	106.49
2	19-A	407	DMS	O-S-C2	5.12	132.14	106.49
2	40-A	407	DMS	O-S-C2	4.73	130.15	106.49
2	27-A	406	DMS	O-S-C2	4.56	129.31	106.49
2	16-A	404	DMS	C2-S-C1	4.29	120.40	98.42
2	38-A	401	DMS	O-S-C1	4.18	127.42	106.49
2	33-A	403	DMS	O-S-C1	4.00	126.51	106.49
2	39-A	407	DMS	C2-S-C1	3.96	118.70	98.42
2	17-A	404	DMS	O-S-C1	3.93	126.18	106.49
2	13-A	403	DMS	O-S-C2	3.85	125.78	106.49
2	39-A	402	DMS	O-S-C2	3.83	125.68	106.49
2	10-A	402	DMS	O-S-C2	3.75	125.25	106.49
2	31-A	402	DMS	O-S-C1	3.71	125.06	106.49
2	4-A	404	DMS	O-S-C1	3.67	124.87	106.49
2	43-A	402	DMS	C2-S-C1	3.67	117.21	98.42
2	27-A	404	DMS	O-S-C1	3.65	124.76	106.49
2	8-A	405	DMS	O-S-C2	3.63	124.66	106.49
2	27-A	402	DMS	O-S-C1	3.60	124.51	106.49
2	2-A	405	DMS	O-S-C2	3.52	124.12	106.49
2	18-A	403	DMS	C2-S-C1	3.46	116.15	98.42
2	17-A	401	DMS	O-S-C2	-3.45	89.23	106.49
2	15-A	403	DMS	O-S-C1	3.45	123.75	106.49
2	43-A	402	DMS	O-S-C1	3.41	123.56	106.49
2	11-A	403	DMS	C2-S-C1	-3.36	81.21	98.42
2	28-A	402	DMS	O-S-C1	3.34	123.22	106.49
2	29-A	407	DMS	O-S-C2	3.29	122.98	106.49
2	12-A	406	DMS	O-S-C2	3.29	122.97	106.49
2	38-A	407	DMS	O-S-C2	3.28	122.94	106.49
2	20-A	405	DMS	O-S-C1	3.25	122.77	106.49
2	39-A	405	DMS	O-S-C1	-3.23	90.31	106.49
2	15-A	407	DMS	O-S-C2	3.22	122.62	106.49
2	17-A	407	DMS	O-S-C2	3.21	122.56	106.49
2	26-A	405	DMS	O-S-C2	3.21	122.55	106.49
2	20-A	403	DMS	O-S-C2	-3.19	90.54	106.49
2	6-A	401	DMS	O-S-C1	3.14	122.20	106.49
2	11-A	405	DMS	O-S-C2	3.10	122.03	106.49
2	35-A	405	DMS	O-S-C2	3.10	122.01	106.49
2	16-A	407	DMS	C2-S-C1	3.09	114.27	98.42
2	23-A	407	DMS	O-S-C2	3.08	121.93	106.49
2	40-A	403	DMS	C2-S-C1	3.05	114.07	98.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	15-A	404	DMS	C2-S-C1	3.05	114.05	98.42
2	26-A	404	DMS	O-S-C2	3.01	121.56	106.49
2	17-A	407	DMS	O-S-C1	3.01	121.53	106.49
2	39-A	402	DMS	O-S-C1	3.00	121.53	106.49
2	3-A	406	DMS	O-S-C2	2.96	121.29	106.49
2	21-A	402	DMS	O-S-C2	2.95	121.25	106.49
2	17-A	406	DMS	C2-S-C1	-2.94	83.35	98.42
2	7-A	403	DMS	O-S-C1	2.93	121.17	106.49
2	20-A	402	DMS	O-S-C2	2.92	121.12	106.49
2	40-A	407	DMS	C2-S-C1	2.91	113.31	98.42
2	15-A	401	DMS	O-S-C2	2.89	120.97	106.49
2	31-A	404	DMS	O-S-C2	2.89	120.94	106.49
2	4-A	404	DMS	C2-S-C1	2.88	113.20	98.42
2	36-A	404	DMS	O-S-C2	2.88	120.93	106.49
2	32-A	404	DMS	C2-S-C1	2.86	113.08	98.42
2	2-A	402	DMS	C2-S-C1	-2.85	83.83	98.42
2	6-A	401	DMS	O-S-C2	2.82	120.60	106.49
2	23-A	402	DMS	O-S-C1	-2.81	92.45	106.49
2	25-A	402	DMS	O-S-C2	2.80	120.51	106.49
2	39-A	402	DMS	C2-S-C1	2.80	112.75	98.42
2	3-A	407	DMS	O-S-C1	2.78	120.42	106.49
2	29-A	402	DMS	O-S-C1	2.76	120.29	106.49
2	33-A	404	DMS	O-S-C2	2.76	120.28	106.49
2	31-A	404	DMS	O-S-C1	2.73	120.16	106.49
2	33-A	406	DMS	O-S-C2	2.71	120.05	106.49
2	8-A	407	DMS	O-S-C1	2.70	119.99	106.49
2	31-A	401	DMS	O-S-C2	2.68	119.89	106.49
2	8-A	405	DMS	C2-S-C1	2.67	112.12	98.42
2	41-A	405	DMS	C2-S-C1	2.67	112.11	98.42
2	12-A	402	DMS	C2-S-C1	-2.67	84.74	98.42
2	12-A	404	DMS	O-S-C1	2.67	119.84	106.49
2	37-A	407	DMS	O-S-C2	2.66	119.82	106.49
2	1-A	405	DMS	O-S-C2	2.63	119.66	106.49
2	12-A	402	DMS	O-S-C1	2.61	119.55	106.49
2	10-A	403	DMS	O-S-C2	2.61	119.55	106.49
2	26-A	401	DMS	O-S-C1	2.61	119.54	106.49
2	39-A	401	DMS	C2-S-C1	2.57	111.60	98.42
2	9-A	401	DMS	O-S-C1	2.57	119.34	106.49
2	26-A	407	DMS	O-S-C1	2.56	119.29	106.49
2	8-A	404	DMS	O-S-C1	-2.55	93.72	106.49
2	11-A	404	DMS	C2-S-C1	2.53	111.38	98.42
2	4-A	401	DMS	C2-S-C1	2.53	111.37	98.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	34-A	405	DMS	O-S-C1	2.49	118.96	106.49
2	18-A	405	DMS	O-S-C1	2.48	118.93	106.49
2	2-A	406	DMS	O-S-C2	2.48	118.92	106.49
2	5-A	404	DMS	O-S-C1	2.48	118.90	106.49
2	5-A	402	DMS	O-S-C2	-2.47	94.15	106.49
2	9-A	402	DMS	O-S-C1	-2.47	94.15	106.49
2	36-A	404	DMS	O-S-C1	2.45	118.76	106.49
2	4-A	404	DMS	O-S-C2	2.45	118.74	106.49
2	12-A	404	DMS	C2-S-C1	-2.43	85.94	98.42
2	41-A	402	DMS	O-S-C1	2.43	118.66	106.49
2	36-A	402	DMS	O-S-C2	2.43	118.64	106.49
2	21-A	407	DMS	O-S-C1	2.42	118.61	106.49
2	30-A	401	DMS	O-S-C1	2.42	118.59	106.49
2	23-A	402	DMS	C2-S-C1	-2.41	86.06	98.42
2	5-A	401	DMS	O-S-C2	-2.41	94.43	106.49
2	10-A	403	DMS	C2-S-C1	2.40	110.71	98.42
2	14-A	403	DMS	O-S-C2	2.39	118.48	106.49
2	8-A	406	DMS	O-S-C2	2.39	118.45	106.49
2	5-A	404	DMS	C2-S-C1	-2.38	86.20	98.42
2	38-A	405	DMS	O-S-C2	2.38	118.43	106.49
2	13-A	403	DMS	C2-S-C1	2.37	110.57	98.42
2	32-A	404	DMS	O-S-C2	2.36	118.33	106.49
2	22-A	403	DMS	O-S-C2	2.36	118.31	106.49
2	32-A	406	DMS	O-S-C2	-2.35	94.74	106.49
2	1-A	401	DMS	O-S-C2	2.34	118.19	106.49
2	22-A	405	DMS	O-S-C1	2.33	118.14	106.49
2	3-A	406	DMS	C2-S-C1	2.32	110.29	98.42
2	34-A	403	DMS	O-S-C1	2.31	118.08	106.49
2	36-A	407	DMS	C2-S-C1	-2.30	86.64	98.42
2	4-A	407	DMS	O-S-C1	2.29	117.97	106.49
2	3-A	405	DMS	C2-S-C1	-2.29	86.71	98.42
2	41-A	407	DMS	O-S-C2	2.28	117.92	106.49
2	43-A	406	DMS	O-S-C2	2.28	117.92	106.49
2	16-A	403	DMS	O-S-C1	2.28	117.90	106.49
2	29-A	407	DMS	C2-S-C1	2.27	110.06	98.42
2	23-A	402	DMS	O-S-C2	2.27	117.84	106.49
2	3-A	406	DMS	O-S-C1	2.26	117.82	106.49
2	34-A	404	DMS	O-S-C1	2.25	117.78	106.49
2	1-A	407	DMS	O-S-C1	2.25	117.77	106.49
2	31-A	407	DMS	O-S-C1	2.24	117.73	106.49
2	15-A	402	DMS	O-S-C1	2.24	117.72	106.49
2	42-A	407	DMS	O-S-C1	2.24	117.70	106.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
2	24-A	402	DMS	O-S-C2	2.22	117.59	106.49
2	30-A	407	DMS	C2-S-C1	-2.20	87.12	98.42
2	42-A	403	DMS	C2-S-C1	2.20	109.72	98.42
2	5-A	403	DMS	O-S-C1	-2.20	95.47	106.49
2	38-A	406	DMS	O-S-C1	2.20	117.51	106.49
2	2-A	407	DMS	O-S-C2	2.19	117.48	106.49
2	25-A	406	DMS	O-S-C2	2.18	117.42	106.49
2	32-A	405	DMS	C2-S-C1	-2.18	87.26	98.42
2	36-A	403	DMS	C2-S-C1	2.17	109.56	98.42
2	42-A	401	DMS	O-S-C1	2.16	117.32	106.49
2	28-A	404	DMS	C2-S-C1	-2.16	87.37	98.42
2	43-A	407	DMS	O-S-C2	2.15	117.26	106.49
2	1-A	406	DMS	O-S-C1	-2.15	95.76	106.49
2	37-A	404	DMS	O-S-C2	-2.14	95.77	106.49
2	25-A	401	DMS	O-S-C2	-2.10	95.97	106.49
2	14-A	404	DMS	O-S-C1	2.09	116.97	106.49
2	13-A	405	DMS	O-S-C2	-2.09	96.05	106.49
2	36-A	406	DMS	O-S-C2	2.06	116.82	106.49
2	29-A	403	DMS	C2-S-C1	2.06	108.97	98.42
2	5-A	405	DMS	O-S-C2	-2.06	96.20	106.49
2	8-A	407	DMS	O-S-C2	2.05	116.77	106.49
2	31-A	403	DMS	O-S-C1	2.04	116.71	106.49
2	33-A	401	DMS	O-S-C1	2.04	116.71	106.49
2	18-A	404	DMS	O-S-C1	2.04	116.68	106.49
2	43-A	405	DMS	O-S-C2	2.03	116.68	106.49
2	16-A	402	DMS	O-S-C1	2.03	116.65	106.49
2	12-A	402	DMS	O-S-C2	-2.03	96.35	106.49
2	10-A	402	DMS	O-S-C1	2.02	116.62	106.49
2	31-A	402	DMS	C2-S-C1	2.01	108.72	98.42

There are no chirality outliers.

There are no torsion outliers.

There are no ring outliers.

No monomer is involved in short contacts.

5.7 Other polymers ⓘ

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues ⓘ

There are no chain breaks in this entry.

6 Fit of model and data ⓘ

6.1 Protein, DNA and RNA chains ⓘ

In the following table, the column labelled ‘#RSRZ> 2’ contains the number (and percentage) of RSRZ outliers, followed by percent RSRZ outliers for the chain as percentile scores relative to all X-ray entries and entries of similar resolution. The OWAB column contains the minimum, median, 95th percentile and maximum values of the occupancy-weighted average B-factor per residue. The column labelled ‘Q< 0.9’ lists the number of (and percentage) of residues with an average occupancy less than 0.9.

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	1-A	306/306 (100%)	3.23	214 (69%) 0 0	0, 0, 0, 0	306 (100%)
1	2-A	0/306	-	-	-	-
1	3-A	0/306	-	-	-	-
1	4-A	0/306	-	-	-	-
1	5-A	0/306	-	-	-	-
1	6-A	0/306	-	-	-	-
1	7-A	0/306	-	-	-	-
1	8-A	0/306	-	-	-	-
1	9-A	0/306	-	-	-	-
1	10-A	0/306	-	-	-	-
1	11-A	0/306	-	-	-	-
1	12-A	0/306	-	-	-	-
1	13-A	0/306	-	-	-	-
1	14-A	0/306	-	-	-	-
1	15-A	0/306	-	-	-	-
1	16-A	0/306	-	-	-	-
1	17-A	0/306	-	-	-	-
1	18-A	0/306	-	-	-	-
1	19-A	0/306	-	-	-	-
1	20-A	0/306	-	-	-	-
1	21-A	0/306	-	-	-	-
1	22-A	0/306	-	-	-	-
1	23-A	0/306	-	-	-	-
1	24-A	0/306	-	-	-	-
1	25-A	0/306	-	-	-	-
1	26-A	0/306	-	-	-	-
1	27-A	0/306	-	-	-	-
1	28-A	0/306	-	-	-	-
1	29-A	0/306	-	-	-	-
1	30-A	0/306	-	-	-	-
1	31-A	0/306	-	-	-	-
1	32-A	0/306	-	-	-	-

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Analysed	<RSRZ>	#RSRZ>2	OWAB(Å ²)	Q<0.9
1	33-A	0/306	-	-	-	-
1	34-A	0/306	-	-	-	-
1	35-A	0/306	-	-	-	-
1	36-A	0/306	-	-	-	-
1	37-A	0/306	-	-	-	-
1	38-A	0/306	-	-	-	-
1	39-A	0/306	-	-	-	-
1	40-A	0/306	-	-	-	-
1	41-A	0/306	-	-	-	-
1	42-A	0/306	-	-	-	-
1	43-A	0/306	-	-	-	-
All	All	306/13158 (2%)	3.23	214 (69%) 0 0	0, 0, 0, 0	306 (100%)

All (214) RSRZ outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	305	PHE	19.9
1	1-A	300	CYS	16.1
1	1-A	302	GLY	13.7
1	1-A	303	VAL	11.5
1	1-A	191	ALA	11.3
1	1-A	24	THR	10.6
1	1-A	304	THR	10.6
1	1-A	154	TYR	10.4
1	1-A	1	SER	9.7
1	1-A	306	GLN	8.9
1	1-A	190	THR	8.9
1	1-A	222	ARG	8.4
1	1-A	25	THR	7.5
1	1-A	71	GLY	7.2
1	1-A	60	ARG	7.1
1	1-A	2	GLY	7.0
1	1-A	142	ASN	7.0
1	1-A	275	GLY	6.8
1	1-A	301	SER	6.7
1	1-A	282	LEU	6.6
1	1-A	286	LEU	6.5
1	1-A	51	ASN	6.5
1	1-A	47	GLU	6.2
1	1-A	193	ALA	6.2
1	1-A	87	LEU	6.1
1	1-A	155	ASP	6.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	45	THR	6.1
1	1-A	41	HIS	6.0
1	1-A	277	ASN	6.0
1	1-A	165	MET	5.9
1	1-A	97	LYS	5.9
1	1-A	128	CYS	5.8
1	1-A	188	ARG	5.8
1	1-A	217	ARG	5.7
1	1-A	117	CYS	5.7
1	1-A	3	PHE	5.6
1	1-A	72	ASN	5.6
1	1-A	298	ARG	5.5
1	1-A	235	MET	5.5
1	1-A	297	VAL	5.4
1	1-A	221	ASN	5.4
1	1-A	50	LEU	5.3
1	1-A	125	VAL	5.2
1	1-A	294	PHE	5.2
1	1-A	119	ASN	5.2
1	1-A	216	ASP	5.1
1	1-A	107	GLN	5.0
1	1-A	276	MET	5.0
1	1-A	153	ASP	5.0
1	1-A	78	ILE	4.9
1	1-A	49	MET	4.9
1	1-A	225	THR	4.9
1	1-A	232	LEU	4.8
1	1-A	46	SER	4.8
1	1-A	129	ALA	4.8
1	1-A	223	PHE	4.7
1	1-A	81	SER	4.5
1	1-A	246	HIS	4.4
1	1-A	69	GLN	4.4
1	1-A	272	LEU	4.3
1	1-A	288	GLU	4.3
1	1-A	75	LEU	4.2
1	1-A	236	LYS	4.2
1	1-A	118	TYR	4.1
1	1-A	8	PHE	4.0
1	1-A	194	ALA	4.0
1	1-A	213	ILE	3.9
1	1-A	141	LEU	3.9

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	274	ASN	3.8
1	1-A	73	VAL	3.8
1	1-A	237	TYR	3.8
1	1-A	218	TRP	3.8
1	1-A	48	ASP	3.7
1	1-A	152	ILE	3.7
1	1-A	27	LEU	3.6
1	1-A	253	LEU	3.6
1	1-A	137	LYS	3.6
1	1-A	207	TRP	3.6
1	1-A	177	LEU	3.6
1	1-A	145	CYS	3.6
1	1-A	110	GLN	3.6
1	1-A	86	VAL	3.5
1	1-A	243	THR	3.5
1	1-A	287	LEU	3.5
1	1-A	230	PHE	3.5
1	1-A	189	GLN	3.5
1	1-A	6	MET	3.5
1	1-A	226	THR	3.5
1	1-A	249	ILE	3.4
1	1-A	171	VAL	3.4
1	1-A	192	GLN	3.4
1	1-A	229	ASP	3.4
1	1-A	134	PHE	3.3
1	1-A	59	ILE	3.3
1	1-A	262	LEU	3.3
1	1-A	108	PRO	3.3
1	1-A	227	LEU	3.2
1	1-A	121	SER	3.2
1	1-A	261	VAL	3.2
1	1-A	214	ASN	3.2
1	1-A	9	PRO	3.2
1	1-A	96	PRO	3.2
1	1-A	279	ARG	3.2
1	1-A	20	VAL	3.2
1	1-A	238	ASN	3.2
1	1-A	37	TYR	3.2
1	1-A	126	TYR	3.2
1	1-A	206	ALA	3.2
1	1-A	270	GLU	3.1
1	1-A	233	VAL	3.1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	234	ALA	3.1
1	1-A	103	PHE	3.1
1	1-A	280	THR	3.1
1	1-A	281	ILE	3.1
1	1-A	296	VAL	3.0
1	1-A	100	LYS	3.0
1	1-A	102	LYS	3.0
1	1-A	106	ILE	3.0
1	1-A	104	VAL	3.0
1	1-A	283	GLY	3.0
1	1-A	219	PHE	3.0
1	1-A	278	GLY	3.0
1	1-A	36	VAL	3.0
1	1-A	268	LEU	3.0
1	1-A	291	PHE	3.0
1	1-A	169	THR	3.0
1	1-A	122	PRO	2.9
1	1-A	292	THR	2.9
1	1-A	90	LYS	2.9
1	1-A	139	SER	2.9
1	1-A	167	LEU	2.9
1	1-A	43	ILE	2.9
1	1-A	215	GLY	2.9
1	1-A	70	ALA	2.8
1	1-A	285	ALA	2.8
1	1-A	254	SER	2.8
1	1-A	67	LEU	2.8
1	1-A	255	ALA	2.8
1	1-A	55	GLU	2.8
1	1-A	259	ILE	2.8
1	1-A	220	LEU	2.8
1	1-A	31	TRP	2.8
1	1-A	61	LYS	2.8
1	1-A	99	PRO	2.8
1	1-A	252	PRO	2.8
1	1-A	91	VAL	2.7
1	1-A	247	VAL	2.7
1	1-A	195	GLY	2.7
1	1-A	266	ALA	2.7
1	1-A	205	LEU	2.7
1	1-A	150	PHE	2.7
1	1-A	156	CYS	2.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	89	LEU	2.6
1	1-A	242	LEU	2.6
1	1-A	35	VAL	2.6
1	1-A	202	VAL	2.6
1	1-A	149	GLY	2.6
1	1-A	256	GLN	2.6
1	1-A	57	LEU	2.6
1	1-A	186	VAL	2.6
1	1-A	66	PHE	2.6
1	1-A	148	VAL	2.6
1	1-A	273	GLN	2.6
1	1-A	168	PRO	2.6
1	1-A	196	THR	2.5
1	1-A	239	TYR	2.5
1	1-A	244	GLN	2.5
1	1-A	92	ASP	2.5
1	1-A	23	GLY	2.5
1	1-A	120	GLY	2.5
1	1-A	53	ASN	2.5
1	1-A	101	TYR	2.5
1	1-A	181	PHE	2.5
1	1-A	258	GLY	2.4
1	1-A	200	ILE	2.4
1	1-A	54	TYR	2.4
1	1-A	151	ASN	2.4
1	1-A	62	SER	2.4
1	1-A	116	ALA	2.4
1	1-A	183	GLY	2.4
1	1-A	74	GLN	2.4
1	1-A	136	ILE	2.4
1	1-A	5	LYS	2.4
1	1-A	18	VAL	2.3
1	1-A	42	VAL	2.3
1	1-A	26	THR	2.3
1	1-A	7	ALA	2.3
1	1-A	80	HIS	2.3
1	1-A	210	ALA	2.3
1	1-A	44	CYS	2.3
1	1-A	212	VAL	2.3
1	1-A	199	THR	2.3
1	1-A	143	GLY	2.3
1	1-A	173	ALA	2.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	RSRZ
1	1-A	21	THR	2.2
1	1-A	224	THR	2.2
1	1-A	184	PRO	2.2
1	1-A	204	VAL	2.2
1	1-A	208	LEU	2.2
1	1-A	65	ASN	2.2
1	1-A	127	GLN	2.2
1	1-A	32	LEU	2.1
1	1-A	39	PRO	2.1
1	1-A	209	TYR	2.1
1	1-A	290	GLU	2.1
1	1-A	140	PHE	2.1
1	1-A	158	SER	2.1
1	1-A	56	ASP	2.1
1	1-A	182	TYR	2.1
1	1-A	161	TYR	2.1
1	1-A	299	GLN	2.1
1	1-A	185	PHE	2.0
1	1-A	260	ALA	2.0
1	1-A	85	CYS	2.0

6.2 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

6.3 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

6.4 Ligands [i](#)

In the following table, the Atoms column lists the number of modelled atoms in the group and the number defined in the chemical component dictionary. The B-factors column lists the minimum, median, 95th percentile and maximum values of B factors of atoms in the group. The column labelled 'Q< 0.9' lists the number of atoms with occupancy less than 0.9.

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors(Å ²)	Q<0.9
2	DMS	1-A	405	4/4	0.45	0.46	19,20,20,20	10
2	DMS	2-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	3-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	DMS	4-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	5-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	6-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	7-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	8-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	9-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	10-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	11-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	12-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	13-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	14-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	15-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	16-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	17-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	18-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	19-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	20-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	21-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	22-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	23-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	24-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	25-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	26-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	27-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	28-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	29-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	30-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	31-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	32-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	33-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	34-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	35-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	36-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	37-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	38-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	39-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	40-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	41-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	42-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	43-A	401	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	1-A	406	4/4	0.45	0.47	19,19,20,20	10
2	DMS	2-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	DMS	3-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	4-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	5-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	6-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	7-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	8-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	9-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	10-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	11-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	12-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	13-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	14-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	15-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	16-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	17-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	18-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	19-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	20-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	21-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	22-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	23-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	24-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	25-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	26-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	27-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	28-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	29-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	30-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	31-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	32-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	33-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	34-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	35-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	36-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	37-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	38-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	39-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	40-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	41-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	42-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	43-A	402	4/4	-	-	18,19,19,19	10
2	DMS	1-A	403	4/4	0.48	0.44	19,19,19,19	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	DMS	2-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	3-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	4-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	5-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	6-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	7-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	8-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	9-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	10-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	11-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	12-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	13-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	14-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	15-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	16-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	17-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	18-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	19-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	20-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	21-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	22-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	23-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	24-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	25-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	26-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	27-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	28-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	29-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	30-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	31-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	32-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	33-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	34-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	35-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	36-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	37-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	38-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	39-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	40-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	41-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	42-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	43-A	403	4/4	-	-	19,19,19,19	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	DMS	1-A	401	4/4	0.53	0.30	20,20,21,21	10
2	DMS	2-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	3-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	4-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	5-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	6-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	7-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	8-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	9-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	10-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	11-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	12-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	13-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	14-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	15-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	16-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	17-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	18-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	19-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	20-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	21-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	22-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	23-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	24-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	25-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	26-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	27-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	28-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	29-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	30-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	31-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	32-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	33-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	34-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	35-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	36-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	37-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	38-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	39-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	40-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	41-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	42-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	DMS	43-A	404	4/4	-	-	19,19,19,19	10
2	DMS	1-A	407	4/4	0.70	0.32	20,20,21,21	10
2	DMS	2-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	3-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	4-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	5-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	6-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	7-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	8-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	9-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	10-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	11-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	12-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	13-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	14-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	15-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	16-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	17-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	18-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	19-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	20-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	21-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	22-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	23-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	24-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	25-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	26-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	27-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	28-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	29-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	30-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	31-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	32-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	33-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	34-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	35-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	36-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	37-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	38-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	39-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	40-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	41-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	DMS	42-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	43-A	405	4/4	-	-	19,20,20,20	10
2	DMS	1-A	402	4/4	0.71	0.61	18,19,19,19	10
2	DMS	2-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	3-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	4-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	5-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	6-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	7-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	8-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	9-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	10-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	11-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	12-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	13-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	14-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	15-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	16-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	17-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	18-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	19-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	20-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	21-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	22-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	23-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	24-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	25-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	26-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	27-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	28-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	29-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	30-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	31-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	32-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	33-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	34-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	35-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	36-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	37-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	38-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	39-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	40-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	DMS	41-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	42-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	43-A	406	4/4	-	-	19,19,20,20	10
2	DMS	1-A	404	4/4	0.72	0.34	19,19,19,19	10
2	DMS	2-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	3-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	4-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	5-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	6-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	7-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	8-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	9-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	10-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	11-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	12-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	13-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	14-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	15-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	16-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	17-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	18-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	19-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	20-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	21-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	22-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	23-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	24-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	25-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	26-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	27-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	28-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	29-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	30-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	31-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	32-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	33-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	34-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	35-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	36-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	37-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	38-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	39-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
2	DMS	40-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	41-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	42-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
2	DMS	43-A	407	4/4	-	-	20,20,21,21	10
3	ZN	1-A	408	1/1	0.93	0.46	19,19,19,19	1
3	ZN	2-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	3-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	4-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	5-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	6-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	7-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	8-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	9-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	10-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	11-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	12-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	13-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	14-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	15-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	16-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	17-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	18-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	19-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	20-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	21-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	22-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	23-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	24-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	25-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	26-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	27-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	28-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	29-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	30-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	31-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	32-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	33-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	34-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	35-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	36-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	37-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	38-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Type	Chain	Res	Atoms	RSCC	RSR	B-factors($\text{\AA}^2$)	Q<0.9
3	ZN	39-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	40-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	41-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	42-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1
3	ZN	43-A	408	1/1	-	-	19,19,19,19	1

6.5 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.